# 目　　录

符号规则……………………………………………………… 1
绪论………………………………………………………… 1
§ 1. 相对论范围的不确定性关系…………………………… 1
第一章　光子………………………………………………… 5
§ 2. 自由电磁场的量子化…………………………………… 5
§ 3. 光子……………………………………………………… 11
§ 4. 规范不变性……………………………………………… 14
§ 5. 量子理论中的电磁场…………………………………… 16
§ 6. 光子的角动量和宇称…………………………………… 18
§ 7. 光子的球面波…………………………………………… 21
§ 8. 光子的极化……………………………………………… 28
§ 9. 双光子系统……………………………………………… 35
第二章　玻色子……………………………………………… 39
§ 10. 零自旋粒子的波动方程 ……………………………… 39
§ 11. 粒子和反粒子 ………………………………………… 44
§ 12. 真中性粒子 …………………………………………… 49
§ 13. $C$、$P$、$T$ 变换 ………………………………… 52
§ 14. 自旋为 1 的粒子的波动方程 ………………………… 59
§ 15. 具有最高整数自旋的粒子的波动方程 ……………… 64
§ 16. 粒子的螺旋性状态 …………………………………… 66
第三章　费米子……………………………………………… 73
§ 17. 四维旋量 ……………………………………………… 73
§ 18. 旋量与四维矢量的联系 ……………………………… 76
§ 19. 旋量的反演 …………………………………………… 80
§ 20. 旋量表象中的狄拉克方程 …………………………… 86
§ 21. 狄拉克方程的对称形式 ……………………………… 89
§ 22. 狄拉克矩阵代数 ……………………………………… 95

§ 23. 平面波 ……………………………………………………99
§ 24. 球面波……………………………………………………103
§ 25. 自旋和统计学的关系……………………………………107
§ 26. 电荷共轭和旋量的时间反演……………………………111
§ 27. 粒子和反粒子的内禀对称性……………………………116
§ 28. 双线性式…………………………………………………119
§ 29. 极化密度矩阵……………………………………………124
§ 30. 二分量费米子……………………………………………130
§ 31. 自旋为 3/2 的粒子的波动方程…………………………135
**第四章 外场中的粒子**……………………………………138
§ 32. 外场中电子的狄拉克方程………………………………138
§ 33. 按 $1/c$ 的幂展开……………………………………143
§ 34. 氢原子能级的精细结构…………………………………148
§ 35. 在有心对称场中的运动…………………………………150
§ 36. 在库仑场中的运动………………………………………156
§ 37. 在有心对称场中的散射…………………………………164
§ 38. 极端相对论情形中的散射………………………………167
§ 39. 库仑场中散射的连续谱波函数系………………………169
§ 40. 平面电磁波场中的电子…………………………………174
§ 41. 外场中的自旋运动………………………………………178
§ 42. 中子在电场中的散射……………………………………184
**第五章 辐射**………………………………………………187
§ 43. 电磁相互作用算符………………………………………187
§ 44. 发射和吸收………………………………………………190
§ 45. 偶极辐射…………………………………………………193
§ 46. 电多极辐射………………………………………………195
§ 47. 磁多极辐射………………………………………………200
§ 48. 角分布和辐射的极化……………………………………203
§ 49. 原子辐射:电型…………………………………………213
§ 50. 原子辐射:磁型…………………………………………218
§ 51. 原子辐射:塞曼效应和斯塔克效应……………………221
§ 52. 原子辐射:氢原子………………………………………225

§ 53. 双原子分子的辐射：电子光谱……231
§ 54. 双原子分子的辐射：振动光谱和转动光谱……239
§ 55. 核辐射……240
§ 56. 光电效应：非相对论情形……244
§ 57. 光电效应：相对论情形……249
§ 58. 氘核的光致蜕变……253
**第六章 光的散射**……259
§ 59. 散射张量……259
§ 60. 自由取向系统的散射……271
§ 61. 分子散射……278
§ 62. 谱线的自然宽度……283
§ 63. 共振荧光……288
**第七章 散射矩阵**……291
§ 64. 散射振幅……291
§ 65. 极化粒子的反应……297
§ 66. 运动学不变量……301
§ 67. 物理区域……304
§ 68. 按分波振幅展开……311
§ 69. 螺旋性散射振幅的对称性……315
§ 70. 不变振幅……322
§ 71. 幺正性条件……327
**第八章 协变微扰论**……333
§ 72. 编时乘积……333
§ 73. 电子散射的费曼图……337
§ 74. 光子散射的费曼图……344
§ 75. 电子的传播函数……348
§ 76. 光子的传播函数……353
§ 77. 图形方法的一般规则……359
§ 78. 交叉不变性……367
§ 79. 虚粒子……368

# 绪　　论

## §1. 相对论范围的不确定性关系

本教程第三卷所阐述的全部量子理论实质上是非相对论性的，并不适用于运动速度可与光速相比拟的那些现象. 乍看起来，似乎可以指望通过多少是直接推广的办法，由非相对论量子力学过渡到相对论性理论. 但是，仔细的研究表明，建立逻辑上严密的相对论性理论，要求引入一些新的物理原理.

回顾一下作为非相对论量子力学基础的几个物理概念（第三卷 §1）. 我们看到，在非相对论量子力学中起基本作用的一个概念是测量，而测量被理解为量子系统与“经典客体”（仪器）相互作用的过程；其结果是量子系统的某些动力学变量（坐标、速度等）具有确定值. 我们还看到，量子力学大大地限制了电子[①]同时具有不同动力学变量的可能性. 坐标和动量的不确定量 $\Delta q$ 和 $\Delta p$ 若同时存在，必满足关系式 $\Delta q\Delta p\sim\hbar$[②]；这两个量中，测量一个的准确度愈高，则同时测量另一个的准确度就愈低.

但重要的是，电子的每一个动力学变量都能在任意短的时间间隔内以任意高的精确度进行测量. 这种情况对于全部非相对论性量子力学起着基本的作用. 正因为这样，作为这个理论结构基础的波函数概念才能引入. 实际上，波函数 $\psi(q)$ 的物理意义在于：它的模的平方决定了在给定时刻对电子进行测量得到某种坐

---

① 与第三卷 § 1 相同，为简单起见，我们说的电子可指任何量子系统.

② 本节中我们用通常的单位.

标值的几率. 显然，原则上能够实现对坐标进行任意精确而迅速的测量是引入这种几率概念的必要前提. 否则，这个概念就变得毫无内容而失去物理意义.

极限速度（光速 $c$）的存在对测量不同物理量的可能性予以新的原则上的限制（Л. Д. Ландау, R. Peierls, (1930).

在第三卷 § 44 中曾得到关系式

$$(v'-v)\Delta p\Delta t\sim\hbar, \tag{1.1}$$

它把电子动量的不确定量 $\Delta p$ 与测量过程的持续时间 $\Delta t$ 联系起来. $v$ 和 $v'$ 是测量前和测量后电子的速度. 从这个关系式得出，只有测量过程本身使电子的速度改变足够大，才能在足够短的时间内对动量进行足够精确的测量（即在很小的 $\Delta t$ 内得到很小的 $\Delta p$）. 在非相对论理论中，这种情况是短时间内动量不可能重复测量的一种表现，但是由于差 $v'-v$ 可以任意大，这里无论如何还没有涉及到原则上是否可以对动量进行任意精确的一次测量的问题，极限速度的存在从根本上改变了事情的状况. 差 $v'-v$ 和速度自身一样，现在不能超过 $c$（更确切地说，不能超过 $2c$）. 在式 (1.1) 中用 $c$ 代替 $v'-v$，我们得到关系式

$$\Delta p\Delta t\sim\frac{\hbar}{c}, \tag{1.2}$$

它原则上决定了在给定的时间间隔 $\Delta t$ 内动量测量的最大可达精度. 这样一来，在相对论理论中，对动量做任意精确而迅速的测量，原则上是不可能的. 只有当测量时间趋于无穷大时，才能精确地测量动量（$\Delta p\to 0$）.

有理由认为，关于电子坐标本身的可测量性问题也发生了变化. 在理论的数学表述上，这表现为坐标的精确测量与自由粒子具有正能量互不相容. 后面我们将会看到，自由粒子相对论波动方程的完全本征函数系（除了具有“正确的”时间关系的解外）也包

含“负频率”的解．在一般情况下，这些函数是限制在不大的空间区域中的电子波包的展开．

将要证明，“负频率”的波函数与反粒子——正电子的存在有关．这些函数在波包展开式中的出现，反映了在测量电子坐标过程中一般不可避免地要形成电子-正电子对．测量过程本身不能控制新粒子的产生，这就使电子坐标的测量失去了意义．

在电子的静止系统中，电子坐标测量的最小误差为

$$\Delta q \sim \frac{\hbar}{mc}. \tag{1.3}$$

此值（从量纲角度考虑是唯一容许的）所对应的动量不确定量为 $\Delta p \sim mc$，它也对应于粒子对形成的最小阈能．

在电子以能量 $\varepsilon$ 运动的参照系中，代替式(1.3)，我们得到

$$\Delta q \sim \frac{c\hbar}{\varepsilon}. \tag{1.4}$$

特别是在极端相对论的极限情形下，能量和动量的关系为 $\varepsilon \approx cp$，这时

$$\Delta q \sim \frac{\hbar}{p} \tag{1.5}$$

即误差 $\Delta q$ 与粒子的德布罗意波长相合①．

对光子来说，极端相对论情形永远存在，因而表达式(1.5)是正确的．这意味着只有当问题的特征线度与波长相比很大时，谈论光子的坐标才有意义．但这不是别的，正是与几何光学相应的“经典”极限情形；只有在几何光学中才能讲光沿一定轨道（光线）的传播．而在量子情形下，当波长不能看成很小时，光子坐标的概

---

① 此处讲的是可以根据实验的任意结果得出有关电子状态结论的那种测量．也就是说，当观察结果的几率不为 1 时，我们必须撇开借助碰撞测量坐标的方法．虽然在这种情形下，根据被测量粒子发生偏转这一事实能够对电子的位置做出结论，但是如果这种偏转不出现，一般就得不到任何结论．

念就变得毫无意义．下面我们将会看到(§ 4)，在理论的数学表述上，光子坐标的不可测量性表现为：不可能由光子的波函数组成必须满足相对论不变性要求的几率密度．

根据以上所述自然可以推想，未来的理论一般不再研究粒子相互作用过程的时间进程．这种理论将证明，在粒子相互作用过程中并不存在可被准确测定的特征量（甚至在通常量子力学的精确度范围内），因而对时间过程的描述如同在非相对论量子力学中谈论经典轨道一样，完全是一种妄想．唯一可被观察的量将是自由粒子——进入相互作用的初态粒子和过程结束所产生的终态粒子——的特征量（动量，极化）（Л. Д. Ландау, R. Peierls, 1930).

在相对论性量子理论中，典型的问题是：求出与粒子系统初、终态(即当 $t\to\pm\infty$ 时)有关的跃迁几率振幅．所有可能状态之间的这些跃迁振幅的总体组成**散射矩阵**或称 ***S* 矩阵**．这个矩阵将包含物理上可观测的粒子之间相互作用的全部信息(W.Heisenberg, 1938).

现时还没有一个完整的、逻辑上严密的相对论性量子理论．我们将看到，对描述粒子的某些具有场论特征的状态方面，现行理论引入了新的物理观点(参看 § 10)．但是这种理论在很大程度上是借助通常的量子力学概念并按其模式建立起来的．这种理论结构在量子电动力学领域内是成功的．由于这种理论缺乏完整的逻辑严密性，当直接应用它的数学工具时，出现了若干发散的表达式；但是有完全确定的方法来消除这些发散，不过这些方法在很大程度上具有半经验的性质．我们确信用这种方法所得到的结果是正确的，归根结底是因为它们与实验符合得很好，而不是因为其基本理论原则的内在一致性和逻辑上的严密性．

# 第一章 光 子

## §2. 自由电磁场的量子化

为了把电磁场作为量子客体处理，一开始就用无限多个分立变量描述场比较方便. 用这种经典描述方法，能使我们直接采用量子力学中惯用的形式表述. 用每个空间点上的势来表述场，实质上是用一组连续变量描述场.

设 $\boldsymbol{A}(\boldsymbol{r}, t)$是自由电磁场的矢量势,满足"横向条件"

$$\operatorname{div}\boldsymbol{A}=0. \tag{2.1}$$

这时标量势 $\Phi=0$,而场 $\boldsymbol{E}$ 和 $\boldsymbol{H}$ 为

$$\boldsymbol{E}=-\dot{\boldsymbol{A}}, \qquad \boldsymbol{H}=\operatorname{rot}\boldsymbol{A}. \tag{2.2}$$

麦克斯韦方程组可化为 $\boldsymbol{A}$ 的波动方程:

$$\Delta\boldsymbol{A}-\frac{\partial^2\boldsymbol{A}}{\partial t^2}=0. \tag{2.3}$$

在经典电动力学中,用一组分立变量描述场的方法,是通过研究一个很大而有限的体积 $V$①中的场引入的（参看第二卷 §52). 让我们略去计算的细节,回顾一下这个方法的引入过程.

有限区域中的场可以展成平面行波,因而它的势可以表示成级数

$$\boldsymbol{A}=\sum_{\boldsymbol{k}}(\boldsymbol{a}_{\boldsymbol{k}}e^{i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}}+\boldsymbol{a}_{\boldsymbol{k}}^{*}e^{-i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}}), \tag{2.4}$$

系数 $\boldsymbol{a}_{\boldsymbol{k}}$ 是时间的函数:

$$\boldsymbol{a}_{\boldsymbol{k}}\sim e^{-i\omega t}, \qquad \omega=|\boldsymbol{k}|. \tag{2.5}$$

① 为了减化公式中的因子,我们假设 $V=1$.

按照条件(2.1)，复矢量 $\boldsymbol{a}_k$ 与相应的波矢量正交：$\boldsymbol{a}_k\cdot\boldsymbol{k}=0$.

式(2.4)中的求和是对波矢量(即它的三个分量 $k_x, k_y, k_z$) 的无限多个分立值进行的. 对连续分布的情形，可利用表达式

$$\frac{\mathrm{d}^3k}{(2\pi)^3}$$

将求和变成积分. 积分遍及 $\boldsymbol{k}$ 空间体积元 $\mathrm{d}^3k=\mathrm{d}k_x\mathrm{d}k_y\mathrm{d}k_z$ 中一切可能的 $\boldsymbol{k}$ 值.

各矢量 $\boldsymbol{a}_k$ 给定后，该区域内的场就完全确定. 于是这些量就可以作为一组分立的经典"场变量". 但是，为了阐明向量子理论过渡的方法，还需要对这些变量进行某种变换，使得场方程在形式上类似于经典力学中的正则方程(哈密顿方程). 场的正则变量被定义为

$$\begin{aligned}\boldsymbol{Q}_k&=\frac{1}{\sqrt{4\pi}}(\boldsymbol{a}_k+\boldsymbol{a}_k^*),\\ \boldsymbol{P}_k&=\frac{-\mathrm{i}\omega}{\sqrt{4\pi}}(\boldsymbol{a}_k-\boldsymbol{a}_k^*)=\dot{\boldsymbol{Q}}_k,\end{aligned}\tag{2.6}$$

这些量显然是实数. 借助正则变量，矢量势可表达成

$$\boldsymbol{A}=\sqrt{4\pi}\sum_k\left(\boldsymbol{Q}_k\cos\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}-\frac{1}{\omega}\boldsymbol{P}_k\sin\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}\right).\tag{2.7}$$

为了求出哈密顿函数 $H$，必须计算场的总能量

$$\frac{1}{8\pi}\int(\boldsymbol{E}^2+\boldsymbol{H}^2)\mathrm{d}^3x,$$

并且用 $\boldsymbol{Q}_k, \boldsymbol{P}_k$ 表示出来. 把 $\boldsymbol{A}$ 表示成(2.7) 的展开式，再由式(2.2)求出 $\boldsymbol{E}$ 和 $\boldsymbol{H}$ 并进行积分，就得到

$$H=\frac{1}{2}\sum_k(\boldsymbol{P}_k^2+\omega^2\boldsymbol{Q}_k^2).$$

每个矢量 $\boldsymbol{P}_k$ 和 $\boldsymbol{Q}_k$ 都垂直于波矢量 $\boldsymbol{k}$，因而都有两个独立的分量. 这些矢量的方向决定了相应的波的极化（偏振）方向. 用

$Q_{k\alpha}, P_{k\alpha}(\alpha=1,2)$ 表示矢量 $\boldsymbol{Q}_k, \boldsymbol{P}_k$ 的两个分量(在垂直于 $\boldsymbol{k}$ 的平面内)，就可以把哈密顿函数改写成

$$H=\sum_{k\alpha}\frac{1}{2}(P_{k\alpha}^2+\omega^2 Q_{k\alpha}^2). \tag{2.8}$$

由此可见，哈密顿函数可以写成一系列独立项之和，其中的每一项只包含一对 $Q_{k\alpha}$ 和 $P_{k\alpha}$，对应着一个具有确定波矢量和极化的行波，其形式与一维谐振子的哈密顿函数相同. 所以，(2.8)也常常称为场的**振子**展开式.

现在来讨论自由电磁场的量子化. 上面所谈的场的经典描述使过渡到量子理论的方法显而易见. 先把正则变量——广义坐标 $Q_{k\alpha}$ 和广义动量 $P_{k\alpha}$——看成遵守如下对易规则的算符:

$$\hat{P}_{k\alpha}\hat{Q}_{k\alpha}-\hat{Q}_{k\alpha}\hat{P}_{k\alpha}=-i \tag{2.9}$$

(具有不同 $\boldsymbol{k}, \alpha$ 的算符都可互相对易). 与此同时，按照(2.2)，势 $\boldsymbol{A}$ 和场强 $\boldsymbol{E}$、$\boldsymbol{H}$ 也都变成了算符(厄密的).

最后，确定场的哈密顿量要求计算积分

$$\hat{H}=\frac{1}{8\pi}\int(\hat{\boldsymbol{E}}^2+\hat{\boldsymbol{H}}^2)d^3x, \tag{2.10}$$

式中的 $\hat{\boldsymbol{E}}$ 和 $\hat{\boldsymbol{H}}$ 是用算符 $\hat{P}_{k\alpha}, \hat{Q}_{k\alpha}$ 表示的. 不过，这时 $\hat{P}_{k\alpha}$ 和 $\hat{Q}_{k\alpha}$ 的不可对易性实际上并没有表现出来，这是因为乘积 $Q_{k\alpha}P_{k\alpha}$ 中带进了因子 $\cos\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}\sin\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}$，它对整个区域的积分为零. 所以，哈密顿算符的最后表达式为

$$\hat{H}=\sum_{k\alpha}\frac{1}{2}(\hat{P}_{k\alpha}^2+\omega^2\hat{Q}_{k\alpha}^2), \tag{2.11}$$

恰好与经典哈密顿函数的形式完全相同，这自然是我们所期待的.

确定这个哈密顿算符的本征值并不要求特别的计算，因为它等同于线性振子的能级问题(参看第三卷 § 23)，所以我们能够直

接写出场的能级

$$E=\sum_{k\alpha}\left(N_{k\alpha}+\frac{1}{2}\right)\omega, \tag{2.12}$$

式中 $N_{k\alpha}$ 为整数.

这个公式的进一步讨论留待下一节进行，现在我们要写出量 $Q_{k\alpha}$ 的矩阵元. 一个振子的坐标矩阵元公式已为大家所熟知（参看第三卷 § 23）. 据此，可立即写出 $Q_{k\alpha}$ 的矩阵元. 非零的矩阵元为

$$\langle N_{k\alpha}|Q_{k\alpha}|N_{k\alpha}-1\rangle=\langle N_{k\alpha}-1|Q_{k\alpha}|N_{k\alpha}\rangle=\sqrt{\frac{N_{k\alpha}}{2\omega}}. \tag{2.13}$$

量 $P_{k\alpha}=\dot{Q}_{k\alpha}$ 的矩阵元与 $Q_{k\alpha}$ 的矩阵元只差一个因子 $\pm i\omega$.

但是，在后面的计算中，更为方便的做法是用线性组合 $\omega Q_{k\alpha}\pm iP_{k\alpha}$ 代替 $Q_{k\alpha}$ 和 $P_{k\alpha}$，这个线性组合只对 $N_{k\alpha}\to N_{k\alpha}\pm1$ 的过渡才有非零的矩阵元. 为此，我们引入算符

$$\hat{c}_{k\alpha}=\frac{1}{\sqrt{2\omega}}(\omega\hat{Q}_{k\alpha}+i\hat{P}_{k\alpha}),\qquad \hat{c}^{+}_{k\alpha}=\frac{1}{\sqrt{2\omega}}(\omega\hat{Q}_{k\alpha}-i\hat{P}_{k\alpha}) \tag{2.14}$$

[经典量 $c_{k\alpha}, c^{*}_{k\alpha}$ 与展开式(2.4)中的系数 $a_{k\alpha}$, $a^{*}_{k\alpha}$ 只差一个因子 $\sqrt{2\pi/\omega}$]. 这些算符的矩阵元为

$$\langle N_{k\alpha}-1|c_{k\alpha}|N_{k\alpha}\rangle=\langle N_{k\alpha}|c^{+}_{k\alpha}|N_{k\alpha}-1\rangle=\sqrt{N_{k\alpha}}. \tag{2.15}$$

根据定义 (2.14) 和对易规则 (2.9)，可得到 $\hat{c}_{k\alpha}$ 和 $\hat{c}^{+}_{k\alpha}$ 的对易规则:

$$\hat{c}_{k\alpha}\hat{c}^{+}_{k\alpha}-\hat{c}^{+}_{k\alpha}\hat{c}_{k\alpha}=1. \tag{2.16}$$

对于矢量势，我们仍回到展开式(2.4)上来，不过此时式中的系数变成了算符. 我们把它写成

$$\hat{A}=\sum_{k\alpha}(\hat{c}_{k\alpha}A_{k\alpha}+\hat{c}^{+}_{k\alpha}A^{*}_{k\alpha}), \tag{2.17}$$

式中

$$A_{k\alpha}=\sqrt{4\pi}\frac{e^{(\alpha)}}{\sqrt{2\omega}}e^{ik\cdot r} \tag{2.18}$$

符号 $e^{(\alpha)}$ 是振子极化方向的单位矢量，与波矢量 $k$ 垂直；对每个 $k$ 来说，都有两个独立的极化方向.

类似地，我们写出算符 $\hat{E}$ 和 $\hat{H}$:

$$\begin{aligned}\hat{E}&=\sum_{k\alpha}(\hat{c}_{k\alpha}E_{k\alpha}+\hat{c}^{+}_{k\alpha}E^{*}_{k\alpha}),\\ \hat{H}&=\sum_{k\alpha}(\hat{c}_{k\alpha}H_{k\alpha}+\hat{c}^{+}_{k\alpha}H^{*}_{k\alpha}),\end{aligned} \tag{2.19}$$

并且有

$$E_{k\alpha}=\mathrm{i}\omega A_{k\alpha}\qquad H_{k\alpha}=[n\times E_{k\alpha}]\qquad (n=k/\omega) \tag{2.20}$$

矢量 $A_{k\alpha}$ 在下述意义上是互相正交的:

$$\int A_{k\alpha}A^{*}_{k'\alpha'}d^{3}x=\frac{2\pi}{\omega}\delta_{\alpha\alpha'}\delta_{kk'}. \tag{2.21}$$

实际上，如果 $A_{k\alpha}$ 和 $A_{k'\alpha'}$ 的差别在于波矢量，它们的乘积中就包含对体积的积分为零的因子 $e^{i(k-k')\cdot r}$；如果它们的差别只在于极化，由于两个独立的极化方向互相正交，则有 $e^{(\alpha)}\cdot e^{(\alpha')*}=0$. 类似的关系对矢量 $E_{k\alpha}$、$H_{k\alpha}$ 也是正确的，它们的正交性可方便地写成如下形式:

$$\frac{1}{4\pi}\int(E_{k\alpha}\cdot E^{*}_{k'\alpha'}+H_{k\alpha}\cdot H^{*}_{k'\alpha'})d^{3}x=\omega\delta_{kk'}\delta_{\alpha\alpha'}. \tag{2.22}$$

将算符(2.19)代入式(2.10)并利用式(2.22)进行积分，就得到用算符 $\hat{c}$、$\hat{c}^{+}$ 表示的场的哈密顿量:

$$\hat{H}=\sum_{k\alpha}\frac{1}{2}\omega(\hat{c}_{k\alpha}\hat{c}^{+}_{k\alpha}+\hat{c}^{+}_{k\alpha}\hat{c}_{k\alpha}). \tag{2.23}$$

在所考虑的表象中[由式(2.15)求出算符 $\hat{c}$、$\hat{c}^{+}$的矩阵元]，这个算符是对角化的，它的本征值当然与式(2.12)一致.

在经典理论中，场的动量定义为积分

$$\boldsymbol{P}=\frac{1}{4\pi}\int[\boldsymbol{E}\times\boldsymbol{H}]\mathrm{d}^3x.$$

过渡到量子理论时，用算符(2.19)代替 $\boldsymbol{E}$ 和 $\boldsymbol{H}$，不难求出

$$\hat{\boldsymbol{P}}=\sum_{k\alpha}\frac{1}{2}(\hat{P}_{k\alpha}^2+\omega^2\hat{Q}_{k\alpha}^2)\boldsymbol{n}, \tag{2.24}$$

这与大家熟知的平面波的能量和动量的经典关系是一致的. 这个算符的本征值为

$$\boldsymbol{P}=\sum_{k\alpha}\boldsymbol{k}\left(N_{k\alpha}+\frac{1}{2}\right). \tag{2.25}$$

根据矩阵元(2.15)建立的算符表象是"占有数表象"——通过给出量子数 $N_{k\alpha}$(**占有数**) 来描写系统(场) 的状态. 在这个表象中，系统的波函数依靠数 $N_{k\alpha}$ 表达，写为 $\Phi(N_{k\alpha},t)$，场算符(2.19)(以及与之相应的哈密顿算符(2.11))就作用在这个函数上. 场算符(2.19)不是时间的显函数，这与非相对论量子力学中惯用的算符的薛定谔表象是一致的. 这时系统的状态 $\Phi(N_{k\alpha},t)$ 却是依赖于时间的，其依赖关系决定于薛定谔方程

$$\mathrm{i}\frac{\partial\Phi}{\partial t}=\hat{H}\Phi.$$

场的这种描写既然以相对论不变的麦克斯韦方程为基础，自然也是相对论不变的. 但是这个不变性并未明显地表现出来，主要是由于空间坐标和时间以极不对称的形式出现在场的描写中.

在相对论性理论中，使场的描写具有更明显的不变性更为合适. 为此目的，必须采用所谓的海森伯表象，在海森伯表象中，算符本身随时间变化(参看第三卷，§ 13). 这样一来，时间和坐标将平等地出现在场算符的表达式中，而系统的状态 $\Phi$ 只是占有数的函数.

对于算符 $\hat{A}$ 来说，向海森伯表象的过渡归结为把式 (2.17)

中每一个 $A_{k\alpha}$ 的因子 $e^{ik\cdot r}$ 换成 $e^{i(k\cdot r-\omega t)}$，即 把 $A_{k\alpha}$ 看成时间的函数:

$$A_{k\alpha}=\sqrt{4\pi}\frac{e^{(\alpha)}}{\sqrt{2\omega}}e^{-i(\omega t-k\cdot r)}. \tag{2.26}$$

这一点不难理解，因为对由初态到终态的跃迁来说，海森伯算符的矩阵元必须包含因子 $\exp\{-i(E_i-E_f)t\}$，$E_i$ 和 $E_f$ 分别是初态和终态的能量（参看第三卷§13）．对于 $N_k$ 减少或增加1的跃迁，这个因子应分别为 $e^{-i\omega t}$ 或 $e^{i\omega t}$．由于上述代换的结果，这个要求得到满足.

今后(不管研究的是电磁场还是粒子的场)，我们将总是使用算符的海森伯表象.

## §3. 光子

现在，我们来进一步讨论所得到的场的量子化公式.

首先，场的能量公式引起下面的困难：场的最低能级对应所有振子的量子数 $N_{k\alpha}$ 等于零的状态（称为**电磁场真空态**）．但是甚至在这个状态中，每个振子还具有非零的"零点能量"$\omega/2$．对无限多个振子求和，将得到无限大的结果．这样，我们就碰到了一种"发散"困难，它是由于现有理论缺乏完整的逻辑严密性而产生的.

如果所谈论的仅是场能量的本征值，只要删去零点振动能量，就能消除这个困难，即把场的能量和动量写成①

$$E=\sum_{k\alpha}N_{k\alpha}\omega,\qquad P=\sum_{k\alpha}N_{k\alpha}k \tag{3.1}$$

---

① 只要把式(2.10)中算符的乘积看成"正规积"，即算符 $\hat{c}^+$ 总是在算符 $\hat{c}$ 的左边，就可以在形式上消除发散困难而不引起矛盾．这时，公式(2.23)变为

$$\hat{H}=\sum_{k\alpha}(\omega\hat{c}^+_{k\alpha}\hat{c}_{k\alpha}).$$

这两个公式使我们能够引入一个贯穿量子电动力学始终的基本概念——**辐射量子**或**光子**①. 也就是说，我们可以把自由电磁场看成粒子的集合，这种粒子每个都具有能量 $\omega(=\hbar\omega)$ 和动量 $\boldsymbol{k}(=\boldsymbol{n}\hbar\omega/c)$. 光子的能量和动量之间的关系与相对论力学中静质量为零、以光速运动的粒子的相同. 占有数 $N_{k\alpha}$ 现在表示具有给定动量 $\boldsymbol{k}$ 和极化 $\boldsymbol{e}^{(\alpha)}$ 的光子数. 光子的极化类似于其他粒子的自旋(光子在这方面的具体性质将在 §6 中讨论).

显然，上节所建立起来的全部数学表述完全符合于把电磁场描述为光子的集合，这正是光子系统的二次量子化方法②. 在这个方法中(参看第三卷 §64)，独立变量是状态的占有数，而算符作用在占有数的函数上. 这时起主要作用的是粒子的"湮灭"和"产生"算符，它们分别使占有数减少或增加 1; $\hat{c}_{k\alpha}$, $\hat{c}^{+}_{k\alpha}$ 就是这类算符: $\hat{c}_{k\alpha}$ 消灭一个状态为 $\boldsymbol{k}$、$\alpha$ 的光子，而 $\hat{c}^{+}_{k\alpha}$ 产生一个这种状态的光子.

对易定则(2.16)对应于服从玻色统计的粒子. 由于任一状态中可容许的光子数不受限制，因此，正如我们所预料的，光子是玻色子(在 §5 中我们还要进一步讨论这一点).

式(2.26) 的平面波 $\boldsymbol{A}_{k\alpha}$ 作为光子湮灭算符的系数出现在式(2.17)的算符 $\hat{\boldsymbol{A}}$ 中，可以把它看作具有一定动量 $\boldsymbol{k}$ 和极化 $\boldsymbol{e}^{(\alpha)}$ 的光子的波函数. 这种看法对应于在非相对论二次量子化方法中把 $\psi$ 算符按粒子的定态波函数展开[不同的是，在(2.17)的展开式中既包含粒子的湮灭算符，又包含粒子的产生算符; 这种差别的意义将在后面阐述，参看 §12].

波函数(2.26)的归一化条件是

---

① 光子的概念是爱因斯坦首次引入的(A. Einstein, 1905).

② 狄拉克首次把二次量子化方法应用于辐射理论(P. A. M. Dirac, 1927).

$$\int \frac{1}{4\pi}(|\boldsymbol{E}_{k\alpha}|^2+|\boldsymbol{H}_{k\alpha}|^2)\mathrm{d}^3x=\omega. \tag{3.2}$$

这是归一化为“在 $V=1$ 的体积中有一个光子”．实际上，等式左端的积分是在给定波函数的状态中光子能量的量子力学平均值①，右端是一个光子的能量．

对于光子，麦克斯韦方程组就相当于“薛定谔方程”．当 $\boldsymbol{A}(\boldsymbol{r},t)$满足条件(2.1)时，就得到波动方程

$$\frac{\partial^2 \boldsymbol{A}}{\partial t^2}-\Delta\boldsymbol{A}=0\ .$$

在任意定态的一般情况下，光子的“波函数”是这个方程的复数解，其时间关系由因子 $e^{-i\omega t}$ 给出．

谈到光子的波函数，我们必须再次强调，绝对不能把它看成光子在空间各处出现的几率振幅——这与非相对论量子力学中波函数的基本意义不同．这是因为(如同§1中所指出的)，光子的坐标概念根本没有物理意义．我们将在下一节末从数学方面进一步讨论这一点．

函数 $\boldsymbol{A}(\boldsymbol{r},t)$ 对坐标作傅里叶展开时的分量，构成动量表象中光子的波函数，表示成 $\boldsymbol{A}(\boldsymbol{k},t)=\boldsymbol{A}(\boldsymbol{k})e^{-i\omega t}$．例如，对于一个给定动量 $\boldsymbol{k}$和极化$\boldsymbol{e}^{(\alpha)}$的状态，动量表象中的波函数就是式(2.26)中的指数因子的系数：

$$\boldsymbol{A}_{k\alpha}(\boldsymbol{k}',\alpha')=\sqrt{4\pi}\frac{\boldsymbol{e}^{(\alpha)}}{\sqrt{2\omega}}\delta_{\boldsymbol{k}\boldsymbol{k}'}\delta_{\alpha'\alpha}. \tag{3.3}$$

既然一个自由粒子的动量是可测量的，动量表象中的波函数就比坐标表象中的波函数有更深刻的物理意义：由它可以求出一定状态中的光子具有各种动量和极化值的几率 $w_{k\alpha}$．按照量子力

① 注意，积分(3.2)中的系数 $1/4\pi$ 两倍于式(2.10)中的通常系数 $1/8\pi$．这种差别归根结底在于矢量 $\boldsymbol{E}_{k\alpha}$、$\boldsymbol{H}_{k\alpha}$ 是复数，而场算符 $\hat{\boldsymbol{E}}$, $\hat{\boldsymbol{H}}$是实数．

学的一般规则，将 $A(\boldsymbol{k}')$ 按一定 $\boldsymbol{k}$ 和 $e^{(\alpha)}$ 值的状态波函数展开，$w_{\boldsymbol{k}\alpha}$ 即为展开式系数模的平方：

$$w_{\boldsymbol{k}\alpha} \propto \left| \sum_{\boldsymbol{k}'\alpha'} A^*_{\boldsymbol{k}\alpha}(\boldsymbol{k}',\alpha') A(\boldsymbol{k}') \right|^2$$

(比例系数由函数的归一化方式决定). 将式(3.3)代入，就得到：

$$w_{\boldsymbol{k}\alpha} \propto |e^{(\alpha)} A(\boldsymbol{k})|^2. \tag{3.4}$$

对两种极化状态求和，便求出光子具有动量 $\boldsymbol{k}$ 的几率：

$$w_{\boldsymbol{k}\alpha} \propto |A(\boldsymbol{k})|^2.$$

## §4. 规范不变性

我们知道，经典电动力学中场势的选择是非单值的：四维势 $A_\mu$ 的分量可以进行任何形如

$$A_\mu \longrightarrow A_\mu + \partial_\mu \chi \tag{4.1}$$

的规范变换，$\chi$ 是坐标和时间的任意函数(参看第二卷 § 18).

对平面波而言，如果仅考虑不改变势的形式［与因子 $\exp(-ik_\mu x^\mu)$ 成正比］的变换，非单值性可归结为可以给波的振幅附加任一与 $k^\mu$ 成正比的四维矢量.

势的非单值性在量子理论中继续存在，当然这时它与场算符或光子波函数相关. 为了避免预先决定势的选择方式，就必须用算符四维势

$$\hat{A}^\mu = \sum_{\boldsymbol{k}\alpha} (\hat{c}_{\boldsymbol{k}\alpha} A^\mu_{\boldsymbol{k}\alpha} + \hat{c}^+_{\boldsymbol{k}\alpha} A^{\mu *}_{\boldsymbol{k}\alpha}) \tag{4.2}$$

的相应展开式取代式(2.17)，这里，波函数 $A^\mu_{\boldsymbol{k}\alpha}$ 是如下形式的四维矢量：

$$A^\mu_{\boldsymbol{k}} = \sqrt{4\pi} \frac{e^\mu}{\sqrt{2\omega}} e^{-ik_\nu x^\nu}, \quad e_\mu e^{\mu *} = -1$$

或者省去四维矢量指标，写成更为简洁的形式：

$$A_k=\sqrt{4\pi}\frac{e}{\sqrt{2\omega}}e^{-ikx},\quad ee^*=-1. \tag{4.3}$$

这里，四维动量$k^\mu=(\omega,\boldsymbol{k})$(因而$kx=\omega t-\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}$)，而$e$为四维单位极化矢量[①].

如果规范变换不改变函数(4.3)对坐标和时间的依赖关系，这样的变换一定是代换

$$e_\mu\longrightarrow e_\mu+\chi k_\mu, \tag{4.4}$$

式中$\chi=\chi(k^\mu)$是任意函数．极化的横向性意味着，总可以选择四维矢量$e$的形式为

$$e^\mu=(0,\boldsymbol{e}),\qquad \boldsymbol{e}\cdot\boldsymbol{k}=0 \tag{4.5}$$

的规范（这种规范我们称之为**三维横向规范**)．写成四维协变形式，这个条件就变成**四维横向**条件

$$ek=0. \tag{4.6}$$

我们注意到，由于$k^2=0$，这个条件(像归一化条件$ee^*=-1$那样)不因变换(4.4)而破坏．另一方面，粒子的四维动量的平方等于零意味着它的质量等于零．这就揭示了规范不变性与光子质量等于零之间的联系(这种联系的其它方面将在§14中讨论)．

对参与某过程的光子的波函数进行规范变换时，任何可观测的物理量都不应该改变．这个**规范不变性**要求在量子电动力学中所起的作用甚至比在经典理论中还要大．我们将在许多例子中看到，规范不变性与相对论不变性一样，是一种强有力的启发性原则．

此外，理论的规范不变性又与电荷守恒定律紧密联系着，我们将在§43中讨论这方面的问题．

---

① 表达式(4.3)不是完全相对论协变(四维矢量)的形式，这是由于我们所用的归一化条件(归一化为有限体积$V=1$)是非协变的．但这不具有原则性意义，并可完全由这种归一化方法所提供的方便所补偿．后面我们将看到，它简直是自动地使所得到的实际物理量具有应有的协变形式．

上一节我们已经提到，光子的坐标波函数不能解释成它在空间各处出现的几率振幅. 从数学方面来讲，这是由于用这种波函数不能构成哪怕是形式上具有几率密度性质的量. 这样的量本质上必须由波函数$A_\mu$及其复共轭的正定双线性组合表示. 此外，它应该满足一定的相对论协变性要求——即它应该是四维矢量的时间分量(这是因为，表示粒子数守恒的连续性方程的四维形式是四维流矢量的散度为零；在这里，四维流矢量的时间分量就是粒子在空间各处出现的几率密度，参看第二卷，§ 29). 另一方面，规范不变性要求四维矢量 $A_\mu$ 只能以反对称张量 $F_{\mu\nu}=\partial_\mu A_\nu-\partial_\nu A_\mu=-i(k_\mu A_\nu-k_\nu A_\mu)$的形式出现在四维流矢量中. 由此可见，四维流矢量应该是 $F_{\mu\nu}$ 和 $F^*_{\mu\nu}$(以及四维矢量 $k_\mu$ 的分量) 的双线性组合. 但是，这样的四维矢量一般不可能组成，这是由于满足所述条件的任何表达式 (例如，$k^\lambda F^*_{\mu\nu}F^\nu_\lambda$)都因横向条件 ($k^\lambda F_{\nu\lambda}=0$) 而等于零，更何况它实际上已不再为正定的了 (因为它包含分量 $k_\mu$ 的奇次幂).

## § 5. 量子理论中的电磁场

电磁场是光子的集合，这是与量子理论中电磁场的物理意义相吻合的唯一描述，它代替了用场强描述场的经典方法. 在光子概念的数学形式中，场强作为二次量子化算符出现.

大家知道，当决定系统定态的量子数很大时，量子系统的性质便趋近于经典情形. 对于一定体积中的自由电磁场来说，这意味着振子的量子数——即光子数 $N_{k\alpha}$ 应该很大. 在这点上，光子服从玻色统计这个事实非常重要. 在理论的数学表述上，玻色统计与经典场性质的关系表现在算符 $c_{k\alpha}, c^+_{k\alpha}$ 的对易规则上. $N_{k\alpha}$ 很大时，这些算符的矩阵元很大，对易关系(2.16) 右端的 1 可以忽略，从而得到

$$\hat{c}_{k\alpha}\hat{c}^{+}_{k\alpha} \approx \hat{c}^{+}_{k\alpha}\hat{c}_{k\alpha},$$

也就是说，这些算符变成了决定经典场强的互相对易的经典量 $c_{k\alpha}$, $c^{*}_{k\alpha}$.

但是，场的准经典性条件还需要更加准确. 问题是，如果所有的 $N_{k\alpha}$ 都很大，那么对所有状态 $\boldsymbol{k},\alpha$ 求和时，场的能量在任何情况下都是无限大，准经典性条件也就变成无意义了.

关于准经典条件问题，具有明确物理意义的提法是基于对场值在某个不大的时间间隔$\Delta t$内求平均的研究. 如果把经典电场 $\boldsymbol{E}$ (或磁场 $\boldsymbol{H}$) 表达成对时间的傅里叶积分，那么，当它在时间间隔 $\Delta t$ 上求平均时，只有那些频率满足 $\omega\Delta t \lesssim 1$ 的傅里叶分量才对平均值 $\overline{\boldsymbol{E}}$ 有明显的贡献，否则，振荡因子 $e^{-i\omega t}$ 的平均值几乎等于零. 所以，在确定平均场的准经典条件时，只需研究 $\omega \lesssim 1/\Delta t$ 的那些量子振子，只要这些振子的量子数很大就行了.

频率在零和 $\omega \sim 1/\Delta t$ 之间的振子数（在 $V=1$ 的体积中）具有数量级①

$$\left(\frac{\omega}{c}\right)^{3} \sim \frac{1}{(c\Delta t)^{3}}. \tag{5.1}$$

单位体积中的总能量 $\sim \overline{\boldsymbol{E}}^{2}$. 这个量除以振子数和单个光子的某种平均能量 ($\sim \hbar\omega$)，我们求得光子数的数量级

$$N_{k} \sim \frac{\overline{\boldsymbol{E}}^{2} c^{3}}{\hbar\omega^{4}}.$$

如果要求这个数很大，我们就得到不等式

$$|\boldsymbol{E}| \gg \frac{\sqrt{\hbar c}}{(c\Delta t)^{2}}. \tag{5.2}$$

这就是所求的把（在时间间隔 $\Delta t$ 上平均的）场当成经典场的条件. 我们看到，场必须足够强——平均间隔 $\Delta t$ 越小场越强. 对

① 本节采用通常的单位.

变化着的场，这个时间间隔自然不应超过场有明显改变的时间间隔．所以，相当弱的变化场在任何情况下都不能看成准经典场．只有在不随时间变化的静态场的情况下，才能假设 $\Delta t \longrightarrow \infty$，使不等式(5.2)的右端趋于零．这意味着静态场永远是经典场．

已经指出，以平面波的叠加形式出现的电磁场的经典表达式，在量子理论中必须看作算符的表达式．但是，这些算符的物理意义非常有限，有物理意义的场算符应该使光子真空态的场值等于零．然而，平方场算符 $\hat{\boldsymbol{E}}^2$ 在基态的平均值虽与场的零点能量只差一个因子，却是无穷大（“平均值”指的是量子力学平均值，即算符的相应对角矩阵元）．即使在形式上删去某个算符(像对场的能量所做的那样)，这个无穷大也是不可避免的．因为在现在的情况下，要做到这一点，就必须把算符 $\hat{\boldsymbol{E}}$、$\hat{\boldsymbol{H}}$ 本身（而不是它们的平方）作某种合理的变形，而这是不可能的．

## §6. 光子的角动量和宇称

和任何粒子一样，光子具有一定的角动量．为了说明光子角动量的性质，我们先回顾一下在量子力学的数学体系中粒子波函数的性质与粒子角动量之间的关系．

粒子的角动量 $\boldsymbol{j}$ 由它的轨道角动量 $\boldsymbol{l}$ 和内禀角动量——自旋 $\boldsymbol{s}$ 组成．自旋为 $s$ 的粒子的波函数是秩数为 $2s$ 的对称旋量，即 $2s+1$ 个分量的集合；当坐标系转动时，这些分量变换成它们的确定组合．轨道角动量与波函数对坐标的依赖性相关；轨道角动量为 $l$ 的状态所对应的波函数，其分量是 $l$ 阶球谐函数的线性组合．

自旋和轨道角动量的一贯可区分性，要求波函数的“自旋”性质和“坐标”性质互相无关：在给定时刻旋量分量对坐标的依存不应该受到任何附加条件的限制．

在动量表象中，波函数对坐标的依存代之以对动量 $\boldsymbol{k}$ 的依存，光子的波函数(在三维横向规范中)是矢量 $\boldsymbol{A}(\boldsymbol{k})$. 矢量等价于二秩旋量，在这个意义上可赋予光子的自旋为 1. 不过，这个矢量波函数遵守横向条件：$\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{A}(\boldsymbol{k})=0$. 这是矢量 $\boldsymbol{A}(\boldsymbol{k})$ 作为动量函数的附加条件. 这样，就不能够同时对所有的矢量分量任意地确定这种函数关系，因而就不能严格区分轨道角动量和自旋.

我们看到，自旋是静止粒子的角动量这个定义也不适用于光子，因为光子以光速运动，其静止参考系本来就是不存在的.

由此可见，对于光子只能谈它的总角动量. 既然描述光子的量中没有任何秩为奇数的旋量，显然，总角动量只能取整数值.

同任何粒子一样，光子的状态也可以用宇称来表征. 宇称是指波函数在坐标反演时的行为（参看第三卷 § 30). 在动量表象中，坐标符号的改变对应着 $\boldsymbol{k}$ 的所有分量改变符号. 反演算符 $\hat{P}$ 作用在标量函数 $\varphi(\boldsymbol{k})$ 上所引起的改变仅仅是 $\hat{P}\varphi(\boldsymbol{k})=\varphi(-\boldsymbol{k})$，当作用在矢量函数 $\boldsymbol{A}(\boldsymbol{k})$ 上时，还必须考虑到：坐标轴方向的改变也改变了矢量的各个分量的符号，所以①，

$$\hat{P}\boldsymbol{A}(\boldsymbol{k})=-\boldsymbol{A}(-\boldsymbol{k}). \tag{6.1}$$

把角动量分为轨道角动量和自旋的做法虽然对光子没有物理意义，但是，作为形式上的辅助量，引入"自旋" $s$ 和"轨道角动量" $l$ 来表达波函数的转动变换性质是比较方便的：$s=1$ 对应于波函数的矢量性，而 $l$ 是出现在波函数中的球谐函数的阶数. 这里我们考虑的是具有一定角动量的光子状态的波函数；对自由粒子来说就是球面波. 特别是，数 $l$ 决定光子状态的宇称：

---

① 我们选定，按照反演算符对极矢量——例如 $\boldsymbol{A}$（或者相应的电矢量 $\boldsymbol{E}=\mathrm{i}\omega\boldsymbol{A}$）——的作用来定义状态的宇称. 这在符号上与对轴矢量 $\boldsymbol{H}=\mathrm{i}(\boldsymbol{k}\times\boldsymbol{A})$ 的作用不同，因为反演不改变轴矢量的方向：

$$\hat{P}\boldsymbol{H}(\boldsymbol{k})=\boldsymbol{H}(-\boldsymbol{k}).$$

$$P=(-1)^{l+1}. \tag{6.2}$$

在同样的意义上，可以把角动量算符 $\boldsymbol{j}$ 表示成和 $\hat{\boldsymbol{s}}+\hat{\boldsymbol{l}}$. 我们知道，角动量算符与坐标系的无限小转动算符有关；在目前情况下，又与这个算符对矢量场的作用有关. 在和 $\hat{\boldsymbol{s}}+\hat{\boldsymbol{l}}$ 中，算符 $\hat{\boldsymbol{s}}$ 作用在矢量指标上，使矢量的分量变换成它们的相互组合；而算符 $\hat{\boldsymbol{l}}$ 作用在这些分量上就如同作用在动量（或坐标）的函数上一样.

光子的角动量 $j$ 给定后，我们来计算能量一定的可能状态数（不考虑相对于角动量方向的 $2j+1$ 重简并).

当 $\hat{l}$ 和 $s$ 独立时，这种计算很简单：将矢量 $\boldsymbol{l}$ 和 $\boldsymbol{s}$ 按矢量法则相加，为了得到所需的 $j$ 值，看有多少种相加方式就行了. 对自旋 $s=1$ 的粒子，若 $j$ 值不为零，这种方法给出具有下列 $l$ 值和宇称的三个状态：

$$l=j, P=(-1)^{l+1}=(-1)^{j+1};$$
$$l=j\pm1, P=(-1)^{l+1}=(-1)^{j}.$$

而如果 $j=0$，则只有宇称 $P=+1$ 的一个状态 $(l=1)$.

但是，在这个计算中没有考虑矢量 $\boldsymbol{A}$ 的横向条件，它的三个分量都被看成是独立的. 因此，还必须从所得到的状态数中减去纵向矢量所对应的状态数. 纵向矢量可以写成 $\boldsymbol{k}\varphi(\boldsymbol{k})$ 的形式，由此可见，就其（对转动的）变换性质而言，它的三个分量才等价于一个标量 $\varphi$①. 因而可以说，与横向条件不相容的附加态对应于具有标量波函数（零秩旋量）——即"零自旋"的粒子状态②. 因此，这个状态的角动量 $j$ 等于 $\varphi$ 中所含球谐函数的阶数；作为光子的

---

① 实际上，谈论一个量的旋转变换性质时，指的是在给定点上，即 $\boldsymbol{k}$ 给定时的变换. 对这样的变换，$\boldsymbol{k}\varphi(\boldsymbol{k})$ 像一个标量一样不变化.

② 应该再次强调，这里所指的并不是任何实际粒子的状态，所进行的计算是形式上的，相当于在数学上用转动群的不可约表示将一组在转动变换下相互重新组合的量进行分类.

状态，它的宇称决定于反演算符对矢量函数 $\boldsymbol{k}\varphi$ 的作用：

$$\hat{P}(\boldsymbol{k}\varphi)=-(-\boldsymbol{k})\varphi(-\boldsymbol{k})=(-1)^{j}\boldsymbol{k}\varphi(\boldsymbol{k}),$$

即宇称等于$(-1)^j$. 由此可见，必须从上面所得到的宇称为$(-1)^j$的状态数($j\neq0$ 时为两个，$j=0$ 时为一个)中减去 1.

最后我们得出结论：当角动量 $j$ 不为零时，光子有一个偶宇称态和一个奇宇称态；$j=0$ 时无论什么样的状态都得不到. 这意味着光子的角动量根本不可能为零，因而 $j$ 只能取 1, 2, 3, …. 由于角动量为零的状态的波函数应该是球对称的，而这对于横波显然是不可能的，因此，不可能有 $j=0$ 是显而易见的.

光子的各种状态都有一定的术语. 角动量为 $j$、宇称为$(-1)^j$的光子叫电$2^j$极光子(或 $Ej$ 光子)，而宇称为$(-1)^{j+1}$时叫磁$2^j$极光子(或 $Mj$ 光子). 例如，一个 $j=1$ 的奇宇称态对应一个电偶极光子，一个 $j=2$ 的偶宇称态对应一个电四极光子，而一个 $j=1$ 的偶宇称态对应一个磁偶极光子①.

## §7. 光子的球面波

光子角动量的可能值确定后，现在应该确定相应的波函数②.

首先，我们考虑一个形式上的问题：怎么样的矢量函数可以作为算符 $\hat{j}^2$ 和 $\hat{j}_z$ 的本征函数？在考虑这个问题时，先不管这些函数中的哪一些会出现在我们所要求的光子波函数中，也不考虑横向条件.

我们将在动量表象中寻找这样的函数. 在动量表象中，坐标算符是$\hat{\boldsymbol{r}}=\mathrm{i}\partial/\partial\boldsymbol{k}$[参看第三卷式(15.12)]，轨道角动量算符是

---

① 这些名称与经典辐射理论的术语相对应. 后面(§46, §47)我们将看到，电型光子和磁型光子的辐射分别由电荷系统的电矩和磁矩决定.

② 这个问题是 Heitler 首次研究的 (W. Heitler, 1936). 解的陈述形式是 B. B. 别列斯捷斯基作出的(1947).

$$\hat{\boldsymbol{l}}=[\hat{\boldsymbol{r}}\times\boldsymbol{k}]=-\mathrm{i}\left[\boldsymbol{k}\times\frac{\partial}{\partial\boldsymbol{k}}\right],$$

即，与坐标表象中的角动量算符相比，区别仅仅是用字母 $\boldsymbol{k}$ 代替 $\boldsymbol{r}$. 因此，在两个表象中，所提问题的解在形式上是一样的.

用 $\boldsymbol{Y}_{jm}$ 表示所求的本征函数，并称之为**球谐矢量**. 它们必须满足方程

$$\hat{\boldsymbol{j}}^2\boldsymbol{Y}_{jm}=j(j+1)\boldsymbol{Y}_{jm},\quad \hat{j}_z\boldsymbol{Y}_{jm}=m\boldsymbol{Y}_{jm} \tag{7.1}$$

($z$ 轴为空间的已知方向). 我们来证明，任何形如 $\boldsymbol{a}Y_{jm}$ 的函数都具有这些性质，这里 $\boldsymbol{a}$ 是由单位矢量 $\boldsymbol{n}=\boldsymbol{k}/\omega$ 构成的任意矢量而 $Y_{jm}$ 是通常的(标量)球谐函数. 我们将按照第三卷 §28 的

$$Y_{lm}(\boldsymbol{n})=(-1)^{\frac{m+|m|}{2}}\mathrm{i}^l\sqrt{\frac{(2l+1)(l-|m|)!}{4\pi(l+|m|)!}}P_l^{|m|}(\cos\theta)\mathrm{e}^{\mathrm{i}m\varphi} \tag{7.2}$$

($\theta,\varphi$ 为方向 $\boldsymbol{n}$ 的球极角①)来定义 $Y_{jm}$. 为此，我们回顾一下第三卷式(29.4)的对易规则:

$$\{\hat{l}_i,a_k\}_-=\mathrm{i}e_{ikl}a_l,$$

等式右端可以写成$(-\hat{s}_ia_k)$，这里 $\hat{s}$ 是自旋为 1 的算符(这个算符对矢量函数的作用正好由等式 $\hat{s}_ia_k=-\mathrm{i}e_{ikl}a_l$ 决定，参看第三卷 § 57，习题 2). 所以我们有

$$\hat{l}_ia_k-a_k\hat{l}_i=-\hat{s}_ia_k.$$

利用这个等式求出

$$\hat{j}_ia_k=(\hat{l}_i+\hat{s}_i)a_k=a_k\hat{l}_i.$$

因而，

$$\hat{\boldsymbol{j}}^2(\boldsymbol{a}Y_{jm})=\boldsymbol{a}\hat{\boldsymbol{l}}^2Y_{jm},\quad \hat{j}_z(\boldsymbol{a}Y_{jm})=\boldsymbol{a}\hat{l}_zY_{jm}.$$

---

① 为后面引用方便起见，请注意 $\theta=0$($\boldsymbol{n}$ 沿 $z$ 轴)时的函数值:

$$Y_{lm}(\boldsymbol{n}_z)=\mathrm{i}^l\sqrt{\frac{2l+1}{4\pi}}\delta_{m0}. \tag{7.2a}$$

既然球谐函数 $Y_{jm}$ 是算符 $\hat{\boldsymbol{l}}^2$ 和 $\hat{l}_z$ 的本征值分别为 $j(j+1)$ 和 $m$ 的本征函数，于是我们就得到等式(7.1)．

我们选择如下三个矢量

$$\frac{\nabla_n}{\sqrt{j(j+1)}}, \qquad \frac{[\boldsymbol{n}\nabla_n]}{\sqrt{j(j+1)}}, \qquad \boldsymbol{n} \tag{7.3}$$

作为矢量 $\boldsymbol{a}$①，就得到三类本质上不同的球谐矢量．因此，我们定义的球谐矢量为：

$$\begin{aligned}
&\mathbf{Y}^{(e)}_{jm} = \frac{1}{\sqrt{j(j+1)}}\nabla_n Y_{jm}, && P=(-1)^j;\\
&\mathbf{Y}^{(m)}_{jm} = [\boldsymbol{n}\times\mathbf{Y}^{(e)}_{jm}], && P=(-1)^{j+1};\\
&\mathbf{Y}^{(l)}_{jm} = \boldsymbol{n}Y_{jm}, && P=(-1)^j,
\end{aligned} \tag{7.4}$$

并给出了每个矢量的宇称 $P$．这三类矢量互相正交，且 $\mathbf{Y}^{(l)}_{jm}$ 相对于 $\boldsymbol{n}$ 是纵矢量，$\mathbf{Y}^{(e)}_{jm}$ 和 $\mathbf{Y}^{(m)}_{jm}$ 是横矢量．

这些球谐矢量可以用标量球谐函数表达：$\mathbf{Y}^{(m)}_{jm}$ 仅用一个 $l=j$ 阶球谐函数表达，而 $\mathbf{Y}^{(e)}_{jm}$ 和 $\mathbf{Y}^{(l)}_{jm}$ 用 $l=j\pm1$ 阶球谐函数表达．这一点是显而易见的，只要把式(7.4)中所给出的宇称与一个矢量场的宇称 $(-1)^{l+1}$（通过有关球谐函数的阶数表示）加以比较就够了．

每一类中的各个球谐矢量互相正交，并按下式归一化：

$$\int \mathbf{Y}_{jm}\mathbf{Y}^*_{j'm'}\,\mathrm{d}o = \delta_{jj'}\delta_{mm'}. \tag{7.5}$$

根据球谐函数 $Y_{jm}$ 的归一化条件，上式对矢量 $\mathbf{Y}^{(l)}_{jm}$ 是显然的．对

---

① 算符 $\nabla_n \equiv |\boldsymbol{k}|\nabla_{\boldsymbol{k}}$，作用在只与方向 $\boldsymbol{n}$ 有关的函数上．在球坐标中，它只有两个分量：

$$\nabla_n = \left(\frac{\partial}{\partial\theta}, \ \frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\varphi}\right).$$

下面用 $\Delta_n$ 表示的算符是拉普拉斯算符的角度部分：

$$\Delta_n = \frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta} + \frac{1}{\sin^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2}.$$

于矢量 $\boldsymbol{Y}^{(e)}_{jm}$，归一化积分为

$$\frac{1}{j(j+1)}\int\nabla_n Y_{jm}\nabla_n Y^*_{j'm'}\,\mathrm{d}o=-\frac{1}{j(j+1)}\int Y^*_{j'm'}\Delta_n Y_{jm}\mathrm{d}o,$$

且由于 $\Delta_n Y_{jm}=-j(j+1)Y_{jm}$，我们便得到式(7.5)．矢量 $\boldsymbol{Y}^{(m)}_{jm}$ 的归一化也归结为一个同样的积分．

毋需对方程(7.1)进行上述直接验证，只要一般地考查有关函数的变换性质，我们就可以得到球谐矢量(7.4)．在上节我们曾用这种方法说明：一个形如 $\boldsymbol{n}\varphi$ 的矢量函数所对应的角动量值 $j$，等于 $\varphi$ 中所含球谐函数的阶数；如果只假定 $\varphi=Y_{jm}$，那么函数 $\boldsymbol{n}\varphi$ 也将对应着一个确定的角动量分量值 $m$．这样，我们立即导出球谐矢量 $\boldsymbol{Y}^{(l)}_{jm}$．如果用矢量 $\nabla_n$ 或 $[\boldsymbol{n}\times\nabla_n]$ 代替乘积 $\boldsymbol{n}\varphi$ 中的 $\boldsymbol{n}$，则§6中关于变换性质的讨论不受影响，于是我们得到另外两类球谐矢量．

现在让我们回到光子的波函数上来．对一个电型光子 $(Ej)$，矢量 $\boldsymbol{A}(\boldsymbol{k})$ 应该具有宇称 $(-1)^j$．球谐矢量 $\boldsymbol{Y}^{(e)}_{jm}$ 和 $\boldsymbol{Y}^{(l)}_{jm}$ 都具有这样的宇称，但只有前者满足横向条件．对一个磁型光子 $(Mj)$，矢量 $\boldsymbol{A}(\boldsymbol{k})$ 应该具有宇称 $(-1)^{j+1}$；具有这种宇称的球谐矢量只有 $\boldsymbol{Y}^{(m)}_{jm}$．因此，一个具有确定角动量 $j$ 及其分量 $m$(和能量 $\omega$)的光子的波函数为

$$\boldsymbol{A}_{\omega jm}(\boldsymbol{k})=\frac{4\pi^2}{\omega^{3/2}}\delta(|\boldsymbol{k}|-\omega)\boldsymbol{Y}_{jm}(\boldsymbol{n}),\qquad(7.6)$$

对电型光子和磁型光子，$\boldsymbol{Y}_{jm}$ 分别为 $\boldsymbol{Y}^{(e)}_{jm}$ 和 $\boldsymbol{Y}^{(m)}_{jm}$．给定的能量值反映在因子 $\delta(|\boldsymbol{k}|-\omega)$ 中．

函数(7.6)的归一化条件为

$$\frac{1}{(2\pi)^4}\int\omega\omega'\boldsymbol{A}^*_{\omega'j'm'}(\boldsymbol{k})\boldsymbol{A}_{\omega jm}(\boldsymbol{k})\,\mathrm{d}^3k=\omega\delta(\omega'-\omega)\delta_{jj'}\delta_{mm'}.$$

(7.7)

对于坐标表象中的波函数，条件(7.7)等价于①

$$\frac{1}{4\pi}\int\{\boldsymbol{E}^*_{\omega' j' m'}(\boldsymbol{r})\boldsymbol{E}_{\omega jm}(\boldsymbol{r})+\boldsymbol{H}^*_{\omega' j' m'}(\boldsymbol{r})\boldsymbol{H}_{\omega jm}(\boldsymbol{r})\}\mathrm{d}^3x$$

$$=\omega\delta(\omega'-\omega)\delta_{jj'}\delta_{mm'}. \tag{7.8}$$

实际上，当用势表达时，等式左端的积分形式为

$$\frac{1}{2\pi}\int\boldsymbol{A}^*_{\omega' j' m'}(\boldsymbol{r})\boldsymbol{A}_{\omega jm}(\boldsymbol{r})\omega'\omega\mathrm{d}^3x,$$

其中

$$\boldsymbol{A}_{\omega jm}(\boldsymbol{r})=\int\boldsymbol{A}_{\omega jm}(\boldsymbol{k})\mathrm{e}^{\mathrm{i}\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}}\frac{\mathrm{d}^3k}{(2\pi)^3},$$

$$\boldsymbol{A}^*_{\omega' j' m'}(\boldsymbol{r})=\int\boldsymbol{A}^*_{\omega' j' m'}(\boldsymbol{k}')\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\boldsymbol{k}'\cdot\boldsymbol{r}}\frac{\mathrm{d}^3k'}{(2\pi)^3}. \tag{7.9}$$

对 $\mathrm{d}^3x$ 的积分给出 $\delta$ 函数 $(2\pi)^3\delta(\boldsymbol{k}'-\boldsymbol{k})$，它又被对 $\mathrm{d}^3k$ 的积分消去，从而积分化为(7.7)的形式.

至此，我们的讨论是指势的横向规范，在这个规范中，标量势 $\Phi=0$. 但是在某些应用中，球面波的其它规范方法或许更为方便.

在动量表象中所容许的势变换是代换

$$\boldsymbol{A}\longrightarrow\boldsymbol{A}+\boldsymbol{n}f(\boldsymbol{k}),\quad \Phi\longrightarrow\Phi+f(\boldsymbol{k}),$$

式中 $f(\boldsymbol{k})$ 是任意函数. 在目前的情况下我们将这样选择 $f(\boldsymbol{k})$，使得新的势用同样的球谐函数表示，并且仍具有确定的宇称. 这些条件使电型光子的势限定为下面的函数：

$$\boldsymbol{A}^{(e)}_{\omega jm}(\boldsymbol{k})=\frac{4\pi^2}{\omega^{3/2}}\delta(|\boldsymbol{k}|-\omega)(\boldsymbol{Y}^{(e)}_{jm}+C\boldsymbol{n}Y_{jm}),$$

$$\Phi^{(e)}_{\omega jm}(\boldsymbol{k})=\frac{4\pi^2}{\omega^{3/2}}\delta(|\boldsymbol{k}|-\omega)CY_{jm}, \tag{7.10}$$

式中 $C$ 为任意常数. 对磁型光子，$\boldsymbol{A}^{(m)}(\boldsymbol{k})$ 的这种附加项使它失

① 这是与(2.22)同种类型的条件。等式右端之所以出现因子 $\delta(\omega'-\omega)$，是由于这里所研究的场（球面波）存在于整个无限大空间，而不是有限体积 $V=1$.

去确定的宇称，因此，为满足上述要求，式（7.6）是唯一可能的选择.

按照式(3.5)和(7.6)，具有一定角动量和宇称的光子沿方向 $\boldsymbol{n}$ 运动且处于立体角元 $\mathrm{d}o$ 中的几率等于

$$w(\boldsymbol{n})\mathrm{d}o=|\boldsymbol{Y}_{jm}^{(e)}(\boldsymbol{n})|^2\mathrm{d}o. \tag{7.11}$$

这是对 $E$ 型光子写出的表达式. 但是由于 $|\boldsymbol{Y}_{jm}^{(m)}|^2=|\boldsymbol{Y}_{jm}^{(e)}|^2$，两类光子的几率分布 $w(\boldsymbol{n})$ 相同.

模的平方 $|\boldsymbol{Y}_{jm}^{(e)}|^2$ 与方位角 $\varphi$ 无关（球谐函数中的因子 $e^{im\varphi}$ 被消去），因此，几率分布 $w(\boldsymbol{n})$ 相对于 $z$ 轴对称. 其次，既然每个球谐矢量都具有确定的宇称，它们的模的平方就不受反演（即极角代换 $\theta\longrightarrow\pi-\theta$）的影响. 这意味着函数 $w(\theta)$ 展成勒让德多项式时只包含偶数阶的项. 展开式系数的确定，归结为计算三个球谐函数乘积的积分，然后对各分量求和. 积分与求和均按照第三卷 §107，§108 的公式进行，其结果是：

$$w(\theta)=(-1)^{j+1}\frac{(2j+1)^{3/2}}{4\pi}\sum_{n=0}^{\infty}(4n+1)\begin{pmatrix} j & j & 2n\\ 0 & 0 & 0\end{pmatrix}\begin{Bmatrix} j & j & 1\\ j & j & 2n\end{Bmatrix}\times P_{2n}(\cos\theta). \tag{7.12}$$

最后，我们来推导按球谐函数展开的球谐矢量的分量表达式. 为此，我们利用第三卷 §107 中定义的矢量的"球分量". 矢量 $\boldsymbol{f}$ 的球分量 $f_\lambda$ 为：

$$f_0=\mathrm{i}f_z,\ f_{+1}=-\frac{\mathrm{i}}{\sqrt{2}}(f_x+\mathrm{i}f_y),\ f_{-1}=\frac{\mathrm{i}}{\sqrt{2}}(f_x-\mathrm{i}f_y). \tag{7.13}$$

如果引入"球单位矢量"：

$$\boldsymbol{e}^{(0)}=\mathrm{i}\boldsymbol{e}^{(z)},\ \boldsymbol{e}^{(+1)}=-\frac{\mathrm{i}}{\sqrt{2}}(\boldsymbol{e}^{(x)}+\mathrm{i}\boldsymbol{e}^{(y)}),$$

$$\boldsymbol{e}^{(-1)}=\frac{\mathrm{i}}{\sqrt{2}}(\boldsymbol{e}^{(x)}-\mathrm{i}\boldsymbol{e}^{(y)}) \tag{7.14}$$

$^{,y,z)}$ 为 $x, y, z$ 轴的单位矢量],那么

$$f=\sum_{\lambda}(-1)^{1-\lambda}f_{-\lambda}e^{(\lambda)}, \quad f_{\lambda}=(-1)^{1-\lambda}fe^{(-\lambda)*}=fe^{(\lambda)}. \tag{7.15}$$

可以用 $3j$ 符号并通过球谐函数将球谐矢量的球分量表示成如下的公式:

$$\begin{cases}(-1)^{j+m+\lambda+1}(\mathbf{Y}_{jm}^{(e)})_{\lambda}=-\sqrt{j}\begin{pmatrix}j+1 & 1 & j\\ m+\lambda & -\lambda & -m\end{pmatrix}Y_{j+1,m+\lambda}\\ \qquad\qquad+\sqrt{j+1}\begin{pmatrix}j-1 & 1 & j\\ m+\lambda & -\lambda & -m\end{pmatrix}Y_{j-1,m+\lambda},\\ (-1)^{j+m+\lambda+1}(\mathbf{Y}_{jm}^{(m)})_{\lambda}=-\sqrt{2j+1}\begin{pmatrix}j & 1 & j\\ m+\lambda & -\lambda & -m\end{pmatrix}Y_{j,m+\lambda},\\ (-1)^{j+m+\lambda+1}(\mathbf{Y}_{jm}^{(l)})=\sqrt{j+1}\begin{pmatrix}j+1 & 1 & j\\ m+\lambda & -\lambda & -m\end{pmatrix}Y_{j+1,m+\lambda}\\ \qquad\qquad+\sqrt{j}\begin{pmatrix}j-1 & 1 & j\\ m+\lambda & -\lambda & -m\end{pmatrix}Y_{j-1,m+\lambda}.\end{cases} \tag{7.16}$$

这些公式是按下述方法推导出来的:三个球谐矢量都具有 $\mathbf{Y}_{jm}=\boldsymbol{a}Y_{jm}$ 的形式,式中的 $\boldsymbol{a}$ 是式(7.3)中的三个矢量之一. 所以

$$\mathbf{Y}_{jm}=\sum_{l\,m'}\langle lm'|\boldsymbol{a}|jm\rangle Y_{lm'},$$

这样,问题归结为求矢量 $a$ 对于轨道角动量本征函数的矩阵元. 按照第三卷(107.6),我们有

$$\langle lm'|a_{\lambda}|jm\rangle=\mathrm{i}(-1)^{j_{\max}-m'}\begin{pmatrix}l & 1 & j\\ -m' & \lambda & m\end{pmatrix}\langle l\|a\|j\rangle,$$

式中 $j_{\max}$ 是 $l$ 和 $j$ 中的较大者. 因此,只要知道非零的约化矩阵

元$\langle l\|a\|j\rangle$就够了，它们由以下公式给出：

$$\begin{aligned}&\langle l-1\|n\|l\rangle=\langle l\|n\|l-1\rangle^*=\mathrm{i}\sqrt{l},\\&\langle l\|\nabla_n\|l-1\rangle=\mathrm{i}(l-1)\sqrt{l},\\&\langle l-1\|\nabla_n\|l\rangle=\mathrm{i}(l+1)\sqrt{l},\\&\langle l\|[\boldsymbol{n}\times\nabla_n]\|l\rangle=\mathrm{i}\sqrt{l(l+1)(2l+1)}.\end{aligned}\tag{7.17}$$

## §8. 光子的极化

对于光子，极化矢量 $\boldsymbol{e}$ 起着波函数"自旋部分"的作用(其限制条件与 §6 中所述的光子自旋概念有关).

出现在光子极化中的各种情况等同于经典电磁波极化的可能类型(参看第二卷 §48).

任意一个极化 $\boldsymbol{e}$ 都可以表示成以某种确定方式选取的两个互相正交的极化 $\boldsymbol{e}^{(1)}$和 $\boldsymbol{e}^{(2)}$($\boldsymbol{e}^{(1)}\cdot\boldsymbol{e}^{(2)*}=0$)的叠加. 在分解式

$$\boldsymbol{e}=e_1\boldsymbol{e}^{(1)}+e_2\boldsymbol{e}^{(2)}\tag{8.1}$$

中，系数 $e_1$ 和 $e_2$ 的模的平方分别决定光子具有极化 $\boldsymbol{e}^{(1)}$或 $\boldsymbol{e}^{(2)}$的几率.

可以选两个互相垂直的线极化作为$\boldsymbol{e}^{(1)}$或$\boldsymbol{e}^{(2)}$，也可以把任一极化分解成两个旋转方向相反的圆极化. 右旋圆极化和左旋圆极化的矢量分别用 $\boldsymbol{e}^{(+1)}$和 $\boldsymbol{e}^{(-1)}$表示. 在坐标系$\xi\eta\zeta$ 中，若$\zeta$轴沿光子方向 $\boldsymbol{n}=\boldsymbol{k}/\omega$，则

$$\boldsymbol{e}^{(+1)}=-\frac{\mathrm{i}}{\sqrt{2}}(\boldsymbol{e}^{(\xi)}+\mathrm{i}\boldsymbol{e}^{(\eta)}),\ \boldsymbol{e}^{(-1)}=\frac{\mathrm{i}}{\sqrt{2}}(\boldsymbol{e}^{(\xi)}-\mathrm{i}\boldsymbol{e}^{(\eta)}).\tag{8.2}$$

换句话说，动量给定的光子可能具有两种不同的极化，这意味着动量的每一个本征值都是二重简并的. 这个性质与光子质量等于零密切相关.

对于一个自由运动的质量不为零的粒子，永远存在着一个静止参考系. 实际上，正是在这个特殊的参考系中，粒子本身所固有

的对称性质明显地表露出来. 在这种情况下，必须考虑对于一切可能的绕心转动（即对于完全球对称群）的对称性. 粒子对这个群的对称性质就是用它的自旋 $s$ 描述的. 自旋决定简并度（可变换为相互线性组合的不同波函数的数目 $2s+1$）. 特别是，具有矢量(三个分量)波函数的粒子所对应的自旋为 1.

对于质量等于零的粒子来说，就不存在静止参考系——在任何参考系中它都以光速运动. 对于这样的粒子，总有一个空间的特定方向——动量矢量$\boldsymbol{k}$ 的方向($\zeta$ 轴). 在这种情况下,显然不存在对整个三维转动群的对称,而只有相对那个特定轴的轴对称.

在轴对称条件下，守恒量仅是粒子的**螺旋性**——角动量在 $\zeta$ 轴上的分量,我们用 $\lambda$ 表示①. 如还要求对通过 $\zeta$ 轴的平面反射对称，则符号相异的 $\lambda$ 值所对应的状态将互相简并,因而当 $\lambda\neq 0$ 时将得到二重简并②. 动量确定的光子状态事实上就对应着这类二重简并态中的一种态,它用"自旋"波函数——平面 $\xi\eta$ 中的矢量 $\boldsymbol{e}$ 描述. 对绕 $\zeta$ 轴的任一转动和通过此轴的平面的反射，这个矢量的两个分量变换为它们的相互组合.

光子的各种极化情况与它的螺旋性的可能值有确定的对应关系. 这种对应关系可以按照第三卷的公式(57.9)建立起来. 那个公式把一个矢量波函数的分量与秩数为 2 的等价旋量联系起来③. 与分量 $\lambda=+1$或$\lambda=-1$对应的矢量 $\boldsymbol{e}$ 只能具有非零的分量 $e_\xi-ie_\eta$或 $e_\xi+ie_\eta$, 即分别是$\boldsymbol{e}=\boldsymbol{e}^{(+1)}$或$\boldsymbol{e}=\boldsymbol{e}^{(-1)}$. 换句话说,$\lambda=+1$ 和$\lambda=-1$ 对应着光子的右旋圆极化和左旋圆极化（在§16 中将根据对自旋分量算符的本征函数的直接计算得到这个结果).

---

① 这与上一节中角动量在指定空间方向( $z$ 轴)上的分量 $m$ 不同.

② 这是对双原子分子的电子项进行分类的方法(第三卷 §78).

③ 记住:波函数的分量作为(这里所说的)粒子角动量的不同分量值的几率振幅，对应着逆变旋量分量.

由此可见，光子的角动量在其运动方向上的分量只有两个可能值($\pm 1$)，零值是不可能的.

光子具有一定动量和极化的状态(在第三卷§14中所阐明的意义上)，是一种纯态；纯态用波函数描述，相应于粒子(光子)状态的量子力学的完全描述. 光子的"混合"态也是可能的，相应于不用波函数而仅用一个密度矩阵的不完全描述.

让我们来研究这样一种光子状态：它在极化方面是混合态，但是有确定的动量值 $\boldsymbol{k}$. 这种状态叫**部分极化态**. 在这样的状态中存在着"坐标"波函数.

光子的极化密度矩阵是与矢量 $\boldsymbol{n}$ 垂直的平面(平面 $\xi\eta$) 内的二秩张量 $\rho_{\alpha\beta}$(指标 $\alpha, \beta$ 只能取两个值). 这个张量是厄密的：

$$\rho_{\alpha\beta}=\rho^{*}_{\beta\alpha}, \tag{8.3}$$

归一化条件是

$$\rho_{\alpha\alpha}\equiv\rho_{11}+\rho_{22}=1. \tag{8.4}$$

由式(8.3)可知，对角分量 $\rho_{11}$ 和 $\rho_{22}$ 为实数. 应用条件(8.4)，可由其中一个确定另一个. 分量 $\rho_{12}$ 是复数，且 $\rho_{21}=\rho^{*}_{12}$. 因此，密度矩阵总共由三个实参数描写.

如果已知极化密度矩阵，就能求出光子具有任何确定极化 $\boldsymbol{e}$ 的几率. 这个几率由张量 $\rho_{\alpha\beta}$ 在矢量 $\boldsymbol{e}$ 方向上的"投影"

$$\rho_{\alpha\beta}e^{*}_{\alpha}e_{\beta} \tag{8.5}$$

决定. 例如，分量 $\rho_{11}$ 和 $\rho_{22}$ 就是沿 $\xi$ 轴和 $\eta$ 轴的线极化几率. 在矢量(8.2)上的投影给出两个圆极化的几率：

$$\frac{1}{2}[1\pm i(\rho_{12}-\rho_{21})]. \tag{8.6}$$

张量 $\rho_{\alpha\beta}$ 的性质不论在形式上还是在本质上都与经典理论中描述部分极化的张量 $J_{\alpha\beta}$ 相同(参看第二卷§50). 在这里让我们回顾一下这些性质中的几条.

对具有确定极化$e$的纯态，张量 $\rho_{\alpha\beta}$ 化为矢量 $e$ 的分量之积：

$$\rho_{\alpha\beta}=e_{\alpha}e_{\beta}^{*}, \tag{8.7}$$

且行列式$|\rho_{\alpha\beta}|=0$. 反之，对非极化光子，所有极化方向都有相等的几率，即

$$\rho_{\alpha\beta}=\frac{1}{2}\delta_{\alpha\beta}. \tag{8.8}$$

这时$|\rho_{\alpha\beta}|=1/4$.

在一般情况下，部分极化用三个斯托克斯实参数 $\xi_1$, $\xi_2$, $\xi_3$① 描写比较方便. 这时，密度矩阵的形式为

$$\rho_{\alpha\beta}=\frac{1}{2}\begin{pmatrix}1+\xi_3 & \xi_1-i\xi_2\\ \xi_1+i\xi_2 & 1-\xi_3\end{pmatrix}. \tag{8.9}$$

三个参数均在$-1$和$+1$之间取值. 在非极化状态中，$\xi_1=\xi_2=\xi=0$；对一个完全极化光子来说，$\xi_1^2+\xi_2^2+\xi_3^2=1$.

参数 $\xi_3$描写轴 $\xi$ 或轴 $\eta$ 方向上的线极化. 光子在这两个轴上线极化的几率分别等于$(1+\xi_3)/2$ 或$(1-\xi_3)/2$. 因此，$\xi_3=+1$ 或 $-1$ 相应于这两个方向上的完全极化.

参数 $\xi_1$ 描写与 $\xi$ 轴的夹角为 $\varphi=\pi/4$ 或 $\varphi=-\pi/4$ 的方向上的线极化. 光子在这两个方向上线极化的几率分别等于 $(1+\xi_1)/2$ 或 $(1-\xi_1)/2$. 只要把张量 $\rho_{\alpha\beta}$ 投影在 $e=(1,\ \pm1)/\sqrt{2}$ 方向上，就不难看到这一点.

最后，参数 $\xi_2$表示圆极化度：按照式(8.6)，光子具有右旋或左旋圆极化的几率分别等于$(1+\xi_2)/2$ 或$(1-\xi_2)/2$. 由于两种极化对应着螺旋性 $\lambda=\pm1$，很明显，在一般情况下，$\xi_2$ 是光子螺旋性的平均值. 我们还看到，对极化为 $e$ 的纯态，

$$\xi_2=\mathrm{i}(e\times e^{*})\cdot n \tag{8.10}$$

请注意(参看第二卷 §50)：$\xi_2$ 和$\sqrt{\xi_1^2+\xi_3^2}$是洛伦兹变换的不

① 不要把参数符号与坐标轴 $\xi$ 的符号混淆!

变量.

后面我们还将遇到时间反演下斯托克斯参数的行为问题. 容易看出，它们对这种变换是不变的. 这一性质显然与极化状态无关,因此,只需对纯态证明即可. 在量子力学中，时间反演相当于把波函数换成它的复共轭(第三卷 § 18). 对于平面极化波，这意味着代换①

$$\boldsymbol{k} \longrightarrow -\boldsymbol{k}, \quad \boldsymbol{e} \longrightarrow -\boldsymbol{e}^*. \tag{8.11}$$

在这种变换下,密度矩阵的对称部分

$$\frac{1}{2}(e_\alpha e_\beta^* + e_\beta e_\alpha^*)$$

以及参数 $\xi_1$ 和 $\xi_3$ 都不改变. 参数 $\xi_2$ 在同一变换中的不变性可以由式(8.10)看出,也可以从 $\xi_2$ 的意义(螺旋性的平均值)看出. 实际上,螺旋性是角动量$\boldsymbol{j}$在方向 $\boldsymbol{n}$ 上的分量,即乘积$\boldsymbol{j}\cdot\boldsymbol{n}$;在时间反演下,这两个矢量都改变符号.

在后面的计算中,我们需要把光子的密度矩阵写成四维形式,即某个四维张量 $\rho_{\mu\nu}$ 的形式. 对于用四维矢量 $e_\mu$ 描述的极化光子而言,这个张量自然定义为

$$\rho_{\mu\nu} = e_\mu e_\nu^*. \tag{8.12}$$

在三维横向规范 $e=(0, \boldsymbol{e})$ 中,如果有一个空间坐标轴选在 $\boldsymbol{n}$ 上,这个四维张量的非零分量便与式(8.7)相合.

对于非极化光子,三维横向规范对应于张量 $\rho_{\mu\nu}$,其分量为:

$$\rho_{ik} = \frac{1}{2}(\delta_{ik} - n_i n_k), \qquad \rho_{0i} = \rho_{i0} = \rho_{00} = 0 \tag{8.13}$$

[如果一个轴在 $\boldsymbol{n}$ 方向上，就回到了式(8.8)]. 但是,直接利用这种三维形式的张量 $\rho_{\mu\nu}$ 并不方便. 不过，我们可以利用密度矩阵

---

① $\boldsymbol{e}$ 的符号的改变是由于时间反演改变了电磁场矢量势的符号，而标量势不改变符号. 所以,对四维矢量 $e$ 来说,时间反演就是变换

$$(e_0, \boldsymbol{e}) \longrightarrow (e_0^*, -\boldsymbol{e}^*). \tag{8.11a}$$

的规范变换

$$\rho_{\mu\nu} \longrightarrow \rho_{\mu\nu} + \chi_\mu k_\nu + \chi_\nu k_\mu \tag{8.14}$$

(式中 $\chi_\mu$ 为任意函数)，并假设

$$\chi_0 = -\frac{1}{4\omega}, \chi_i = \frac{k_i}{4\omega^2},$$

就得到简单的四维表达式

$$\rho_{\mu\nu} = -\frac{1}{2} g_{\mu\nu} \tag{8.15}$$

以代替式(8.13).

部分极化光子的密度矩阵的四维形式很容易得到，只要把式(8.9)的二维张量先改写成三维形式就行了:

$$\rho_{ik} = \frac{1}{2}(e_i^{(1)} e_k^{(1)} + e_i^{(2)} e_k^{(2)}) + \frac{\xi_1}{2}(e_i^{(1)} e_k^{(2)} + e_i^{(2)} e_k^{(1)})$$
$$-\frac{\mathrm{i}\xi_2}{2}(e_i^{(1)} e_k^{(2)} - e_i^{(2)} e_k^{(1)}) + \frac{\xi_3}{2}(e_i^{(1)} e_k^{(1)} - e_i^{(2)} e_k^{(2)}),$$

式中 $\boldsymbol{e}^{(1)}$,，$\boldsymbol{e}^{(2)}$ 是沿 $\xi$ 轴和 $\eta$ 轴的单位矢量. 然后，用类空的实四维单位矢量$e^{(1)}$,$e^{(2)}$代换这些三维矢量，就得到所要求的推广. $e^{(1)}$, $e^{(2)}$互相正交，并且与光子的四维动量 $k$ 正交:

$$\begin{aligned} e^{(1)2} = e^{(2)2} = -1, \\ e^{(1)} e^{(2)} = 0, \\ e^{(1)} k = e^{(2)} k = 0. \end{aligned} \tag{8.16}$$

在三维横向规范中，$e^{(1)} = (0, \boldsymbol{e}^{(1)})$，$e^{(2)} = (0, \boldsymbol{e}^{(2)})$.

所以光子的四维密度矩阵为

$$\rho_{\mu\nu} = \frac{1}{2}(e_\mu^{(1)} e_\nu^{(1)} + e_\mu^{(2)} e_\nu^{(2)}) + \frac{\xi_1}{2}(e_\mu^{(1)} e_\nu^{(2)} + e_\mu^{(2)} e_\nu^{(1)}) -$$
$$-\frac{\mathrm{i}\xi_2}{2}(e_\mu^{(1)} e_\nu^{(2)} - e_\mu^{(2)} e_\nu^{(1)}) + \frac{\xi_3}{2}(e_\mu^{(1)} e_\nu^{(1)} - e_\mu^{(2)} e_\nu^{(2)}). \tag{8.17}$$

四维矢量$e^{(1)}$，$e^{(2)}$在实际选取时是否方便，要根据所研究问题的具

体条件决定.

必须注意，条件(8.16)并没有唯一地规定 $e^{(1)}$ 和 $e^{(2)}$ 的选取.如果一个四维矢量 $e_\mu$ 满足这些条件，那么，任何形如 $e_\mu+\chi k_\mu$ 的四维矢量也将满足这些条件（因为 $k^2=0$）. 出现这种非唯一性是因为密度矩阵在规范变换下也不是唯一的.

式(8.17)中的第一项对应着非极化态，因此，按照式(8.15)，可以用 $-g_{\mu\nu}/2$ 代换它. 这样的代换又相当于某种规范变换.

当利用形如式(8.17)那样的四维张量(由两个独立的四维矢量表示）进行运算时，采用下面的形式手段比较方便. 先把张量(8.17)写成如下形式:

$$\rho_{\mu\nu}=\sum_{a,b=1}^{2}\rho^{(ab)}e_\mu^{(a)}e_\nu^{(b)},$$

系数 $\rho^{(ab)}$ 表示成二行矩阵

$$\rho=\begin{pmatrix}\rho^{(11)} & \rho^{(12)}\\ \rho^{(21)} & \rho^{(22)}\end{pmatrix}.$$

与任何厄密二行矩阵一样，它可以用四个独立的二行矩阵——泡利矩阵 $\sigma_x$、$\sigma_y$, $\sigma_z$ 和单位矩阵 1 表示出来. 具体表达式为

$$\rho=\frac{1}{2}(1+\boldsymbol{\xi}\cdot\boldsymbol{\sigma}),\boldsymbol{\xi}=(\xi_1,\xi_2,\xi_3), \tag{8.18}$$

只要利用著名的泡利矩阵表达式(18.5)，并与式(8.17)直接进行比较，就不难得到上述结果(当然，把三个量 $\xi_1,\xi_2,\xi_3$ 合并成"矢量"$\boldsymbol{\xi}$ 纯粹是形式上的，仅仅是为了标记上的方便).

## 习　题

对坐标"轴"为圆极化单位矢量(8.2)的表象写出光子的密度矩阵.

**解** 张量在新坐标轴($\alpha$, $\beta=\pm1$)上的分量 $\rho'_{\alpha\beta}$ 由张量(8.9)在单位矢量(8.2)上的投影得到:

$$\rho'_{11}=\rho_{\alpha\beta}e_{\alpha}^{(+1)*}e_{\beta}^{(+1)},\ \rho'_{1,-1}=\rho_{\alpha\beta}e_{\alpha}^{(+1)*}e_{\beta}^{(-1)},\ \cdots,$$

$$\rho'=\frac{1}{2}\begin{pmatrix}1+\xi_2 & -\xi_3+i\xi_1\\ -\xi_3-i\xi_1 & 1-\xi_2\end{pmatrix}.$$

## § 9. 双光子系统

用类似于 § 6 中的讨论方法可以计算较复杂的双光子系统中可能状态的数目(Л. Ландау, 1948).

我们将在双光子的质心坐标系中进行讨论. 两个光子的动量是 $\boldsymbol{k}_1=-\boldsymbol{k}_2\equiv\boldsymbol{k}$①. 双光子系统的波函数(在动量表象中)可以表示成二秩三维张量 $A_{ik}(\boldsymbol{n})$,即由两个光子矢量波函数的双线性组合构成的张量. 这个张量的每一个下标对应一个光子($\boldsymbol{n}$ 是 $\boldsymbol{k}$ 方向上的单位矢量). 每个光子的横向性由张量 $A_{ik}$ 与矢量 $\boldsymbol{n}$ 的正交性表示:

$$A_{il}n_l=0,\qquad A_{lk}n_l=0. \tag{9.1}$$

光子的互相交换意味着张量 $A_{ik}$ 交换下标,同时改变 $\boldsymbol{n}$ 的符号. 因为光子服从玻色统计,所以

$$A_{ik}(-\boldsymbol{n})=A_{ki}(\boldsymbol{n}). \tag{9.2}$$

一般来说,张量 $A_{ik}$ 对其下标并不是对称的. 我们把它分成对称部分($s_{ik}$)和反对称部分($a_{ik}$): $A_{ik}=s_{ik}+a_{ik}$. 这两个部分显然分别满足关系式(9,2)[以及正交性条件(9,1)]. 由此得出:

$$s_{ik}(-\boldsymbol{n})=s_{ik}(\boldsymbol{n}), \tag{9.3}$$

$$a_{ik}(-\boldsymbol{n})=-a_{ik}(\boldsymbol{n}). \tag{9.4}$$

坐标反演本身并不改变二秩张量分量的符号,但要改变 $\boldsymbol{n}$ 的符号. 因此,由式(9.3)不难看出:波函数 $s_{ik}$ 对反演对称,即对应于

---

① 这样的参考系总是存在的,除非两个光子在同一方向上运动. 这种双光子的总动量 $\boldsymbol{k}_1+\boldsymbol{k}_2$ 和总能量 $\omega_1+\omega_2$ 之间的关系与单一光子的相同,因此,使 $\boldsymbol{k}_1+\boldsymbol{k}_2=0$ 的参考系是不存在的.

光子系统的偶宇称态，而波函数 $a_{ik}$ 对应于奇宇称态.

二秩反对称张量等价于（对偶于）某个轴矢量 $\boldsymbol{a}$，$\boldsymbol{a}$ 的分量可以用张量的分量表示成 $a_i=\frac{1}{2}e_{ikl}a_{kl}$，这里 $e_{ikl}$ 是单位反对称张量（参看第二卷 § 6）. 张量 $a_{kl}$ 与矢量 $\boldsymbol{n}$ 的正交性意味着矢量 $\boldsymbol{a}$ 和 $\boldsymbol{n}$ 是平行的①，因此，可以写出 $\boldsymbol{a}=\boldsymbol{n}\varphi(\boldsymbol{n})$，这里 $\varphi$ 为标量. 按照式(9.4)，应该有 $\boldsymbol{a}(-\boldsymbol{n})=-\boldsymbol{a}(\boldsymbol{n})$，因此

$$\varphi(-\boldsymbol{n})=\varphi(\boldsymbol{n}).$$

这个等式意味着标量 $\varphi$ 只能是偶数阶 $L$（包括零阶）的球谐函数的一次式.

我们看到，反对称张量 $a_{ik}$ 就其（对旋转的）变换性质而言，等价于一个单一的标量（与 20 页的脚注①比较）. 当给后者赋予零"自旋"，该状态的角动量就是 $J=L$. 由此可见，张量 $a_{ik}$ 所对应的光子系统的状态具有偶数角动量 $J$ 和奇数宇称.

我们现在来研究对称张量 $s_{ik}$. 既然当 $\boldsymbol{n}$ 改变符号时 $s_{ik}$ 不变，它就对应着光子系统的偶宇称. 由此得出，$s_{ik}$ 的所有分量均可用偶数阶 $L$（包括 $L=0$）的球谐函数表示. 我们知道，任一对称的二秩张量 $s_{ik}$ 都可表达成标量($s_{ii}$)与迹等于零($s'_{ii}=0$)的对称张量 $s'_{ik}$ 之和.

标量 $s_{ii}$ 可赋予零"自旋"，因而它所对应的状态具有偶数角动量 $J=L$；而张量 $s'_{ik}$ 具有"自旋"2（参看第三卷 § 57）. 按照角动量叠加原理，把这个"自旋"与偶数"轨道角动量"$L$ 相叠加，我们求得：当 $J$ 为非零的偶数时，可以有三个状态($L=J\pm2, J$)，而当 $J$ 为非 1 的奇数时，有两个状态($L=J\pm1$). 例外情形是 $J=0$ ($L=2$)有一个状态和 $J=1$ 有一个状态($L=2$).

---

① 由于 $a_{ik}=e_{ikl}a_l$，正交性条件给出

$$a_{ik}n_k=e_{ikl}a_ln_k=(\boldsymbol{n}\times\boldsymbol{a})_i=0.$$

但是，在这些计算中还没有考虑张量 $s_{ik}$ 与矢量$\boldsymbol{n}$的正交性条件. 因此，还必须从上面所得到的状态数中减去与矢量 $\boldsymbol{n}$“平行”的二秩对称张量所对应的状态数. 这样的张量（记做 $s''_{ik}$)可以表示成

$$s''_{ik}=n_i b_k+n_k b_i,$$

式中 $b$ 是某一确定矢量. 按照式(9.3) 这个矢量应该满足条件 $\boldsymbol{b}(-\boldsymbol{n})=-\boldsymbol{b}(\boldsymbol{n})$. 由此可见，给出“多余”状态的张量 $s''_{ik}$ 等价于一个奇矢量. 这个矢量只能用阶数 $L$ 为奇数的球谐函数表示. 如果再注意到这个矢量具有“自旋”为 1，我们求得：对任一 $J\neq 0$ 的偶角动量，有两个状态 ($L=J\pm 1$)；而对任一奇数 $J$，有一个状态 ($L=J$)；$J=0$ 有一个状态($L=1$)是一例外情形.

将所得结果归结到一起，我们得出下表. 表中指出双光子系统(总动量等于零)具有不同的总角动量 $J$ 时，宇称为偶数和奇数的可能状态数：

| $J$ | 偶宇称 | 奇宇称 |
|---|---|---|
| 0 | 1 | 1 |
| 1 | —— | —— |
| $2k$ | 2 | 1 |
| $2k+1$ | 1 | —— |

(9.5)

($k$ 为非零的正整数). 我们看到，$J$ 为奇数时没有奇宇称态，且 $J=1$ 是不可能的[①].

双光子系统的波函数 $A_{ik}$ 决定了它们的极化态之间的相互关联. 两个光子同时具有一定的极化 $\boldsymbol{e}_1$ 和 $\boldsymbol{e}_2$ 的几率正比于

$$A_{ik}e^*_{1i}e^*_{2k}.$$

换句话说，如果已知一个光子的极化 $\boldsymbol{e}_1$，则另一个光子的极化 $\boldsymbol{e}_2$ 正比于

① 这些结果的另一种推导方法可参看 §70 习题 1.

$$e_{2k} \propto A_{ik} e^*_{1i}. \tag{9.6}$$

当系统为奇宇称时，$A_{ik}$ 等于反对称张量 $a_{ik}$，这时

$$e_2 e^*_1 \propto a_{ik} e^*_{1i} e^*_{1k} = 0,$$

即这两个光子的极化互相正交．在线极化的情况下，这意味着它们的极化方向互相垂直；而在圆极化的情况下，则意味着两个光子的旋转方向相反．

$J=0$ 的偶宇称态用对称张量描述，这个张量可化成一个标量

$$s_{ik} = \text{const} \cdot (\delta_{ik} - n_i n_k).$$

因此，从式(9.6)得出 $e_1 = e^*_2$．在线极化的情况下，这意味着两个光子的极化方向平行；而在圆极化的情况下则意味着它们的旋转方向仍相反．既然 $J=0$ 时两个光子的角动量在同一方向 $\boldsymbol{k}$ 上的分量和应该等于零（因为在相反方向 $\boldsymbol{k}_1$ 和 $\boldsymbol{k}_2$ 上的分量——即螺旋性——这时是相等的），后一结果是显而易见的．

# 第二章 玻 色 子

## § 10. 零自旋粒子的波动方程

在第一章中，我们从经典范围内场的已知性质出发，并依赖普通量子力学的概念，建立起对自由电磁场的量子描述，把场看作许多光子组成的系统．这种描述所具有的许多特点，也是粒子的相对论性量子理论描述所具有的．

电磁场是具有无限多个自由度的系统．对这种系统，粒子(光子)数不守恒，具有任意粒子数的状态也是可能的①．一般来说，在相对论性理论中．任何粒子组成的系统都应该具有这样的性质．在非相对论性理论中，粒子的相互作用不影响它们的总质量(静止质量)，质量守恒定律决定了粒子数守恒．譬如说，一个电子系统的总质量没有改变，这意味着电子的数目也没改变．而在相对论力学中没有质量守恒定律，只有系统的总能量(包括粒子的静止能量)守恒．所以，粒子数不一定守恒．因而，粒子的任何相对论性理论都必须是无限多个自由度的系统的理论．换句话说，这样的粒子理论一定具有场论的性质．

二次量子化能令人满意地描述粒子数可变的系统(第三卷§64, § 65)．在电磁场的量子描述中，二次量子化算符是四维势$\hat{A}$，它由各个粒子(光子)的(坐标)波函数以及它们的产生、湮灭算符表达．在粒子系统的描述上，起类似作用的是量子化的波函数算符．为了建立这种算符，首先必须知道一个自由粒子的波函数形式及

① 当然，实际上光子数只能因不同的相互作用过程而改变．

这个函数所满足的方程.

应该强调，自由粒子的场仅仅是个辅助概念. 真实的粒子总处在相互作用中，理论的任务就是研究这些相互作用. 而任何相互作用都相当于碰撞，可以把碰撞前后的系统看成自由粒子的集合. 我们在 § 1 中曾经指出，这是唯一可测量的客体. 因此，我们利用自由粒子的场作为描述初态和终态的手段.

让我们先考虑零自旋粒子的相对论性描述. 这种情况下由于数学上简单，此种描述的基本思想和特点显得最为明白.

只要给定自由粒子(无自旋)的动量 $\boldsymbol{p}$，它的状态就完全确定. 粒子的能量 $\varepsilon$ 为① $\varepsilon^2=\boldsymbol{p}^2+m^2$ ($m$为粒子的质量)，或者写成四维形式:

$$p^2=m^2. \tag{10.1}$$

我们知道，动量守恒定律和能量守恒定律与空间和时间的均匀性相关，也就是说，与四维坐标系任意平移时的对称性相关. 在量子描述中，这种对称性要求意味着，在四维坐标平移变换下，四维动量一定的粒子的波函数只能乘以一个相因子（其模等于 1 ）. 满足这个要求的波函数只能是指数为四维坐标一次式的指数函数. 换句话说，具有一定四维动量 $p^\mu=(\varepsilon, \boldsymbol{p})$ 的自由粒子的状态波函数应该是一个平面波:

$$\text{const}\cdot e^{-ipx}, \quad px=\varepsilon t-\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{r} \tag{10.2}$$

(在相对论性理论中指数上的符号选取本身是任意的，此处的取法与非相对论情形相合).

对满足条件(10.1)的任意四维矢量 $p$，波动方程应该有(10.2)的函数作为特解. 叠加原理要求：函数(10.2)的任意线性组合也描述粒子的状态，因而也应该是方程的解. 因此，方程应该是线性

① 我们用 $\varepsilon$ 表示一个粒子的能量，以区别粒子系统的能量 $E$.

的. 最后，方程的阶数应该尽可能低，较高的阶数会产生多余的解.

自旋是粒子在与其相对静止的参考系中的角动量. 如果粒子的自旋为 $s$，那么在静止参考系中，它的波函数是 $2s$ 秩三维旋量，而为了描述任意参考系中的粒子，波函数应该用四维量表示.

零自旋粒子在静止参考系中用三维标量描述，但是这样的标量可以有不同的四维"根源"：四维标量 $\psi$ 或类时的四维矢量 $\psi_\mu$ 的第四个分量. 在静止参考系中，四维矢量 $\psi_\mu$ 不为零的分量只有 $\psi_0$①.

对自由粒子来说，能够进入波动方程的唯一算符是四维动量算符 $\hat{p}$，它的分量是坐标和时间的微分算符：

$$\hat{p}^\mu = \mathrm{i}\partial^\mu = \left(\mathrm{i}\frac{\partial}{\partial t}, -\mathrm{i}\nabla\right). \tag{10.3}$$

波动方程必须是用算符 $\hat{p}$ 表示的量 $\psi$ 和 $\psi_\mu$ 之间的微分关系. 这种关系当然应该表示成相对论不变式，即

$$m\psi_\mu = \hat{p}_\mu\psi, \qquad \hat{p}^\mu\psi_\mu = m\psi, \tag{10.4}$$

式中的 $m$ 是表征粒子的有量纲的常数②.

把式(10.4)的第一个方程中的 $\psi_\mu$ 代入第二个方程，我们得到

$$(\hat{p}^2 - m^2)\psi = 0 \tag{10.5}$$

(O. Klein, B. A. Фок, 1926; W. Gordon, 1927). 这个方程的明显形式是

$$-\partial_\mu\partial^\mu\psi \equiv \left(-\frac{\partial^2}{\partial t^2} + \Delta\right)\psi = m^2\psi. \tag{10.6}$$

将平面波形式(10.2)的 $\psi$ 代入其中，我们得到 $p^2 = m^2$. 由此可

---

① 与此类似，较高秩四维张量的时间分量也是其"根源"，但是这种情况会导致较高阶的方程式.

② 式(10.4) 中引入的常数 $m$ 应使 $\psi_\mu$ 和 $\psi$ 具有同一量纲. 在这两个方程中引入不同的常数 $m_1$ 和 $m_2$ 是毫无意义的，因为只要重新定义 $\psi$ 和 $\psi_\mu$ 总可以使它们相同.

见，$m$ 是粒子的质量. 我们看到，方程(10.5)的形式是显而易见的，因为 $p^2$ 是可由 $p$ 组成的唯一的标量算符(由于同样的原因，对具有任意自旋的粒子，其波函数的每一个分量都满足类似方程——后面我们将不止一次地看到这点).

由此可见，零自旋粒子基本上只用一个遵守二阶方程(10.5)的单一(四维)标量 $\psi$ 描述. 在一阶方程(10.4)中，起波函数作用的是量 $\psi$ 和 $\psi_\mu$ 的集合，而四维矢量 $\psi_\mu$ 为标量 $\psi$ 的四维梯度. 在静止参考系中，粒子的波函数与(空间)坐标无关，因而四维矢量 $\psi_\mu$ 的空间分量理应为零.

为了进行二次量子化，最好把粒子的能量和动量表示成($\psi$ 和 $\psi^*$ 的)某个双线性组合的空间积分，此双线性组合代表这些量的空间密度. 换句话说，必须求出方程(10.5)所对应的能量-动量张量 $T_{\mu\nu}$. 借助这个张量，能量和动量守恒定律表示成方程

$$\partial_\mu T^\mu_\nu = 0. \tag{10.7}$$

按照场论的一般法则(参看第二卷 § 32)，我们先写出能导出方程(10.5)的变分原理. 变分原理要求，对某个实四维标量 $L$——场的拉格朗日函数密度①——的“作用量积分”

$$S = \int L \mathrm{d}^4 x \tag{10.8}$$

应取最小值. 利用标量 $\psi$(和算符 $\partial^\mu$)可以组成实双线性标量表达式.

$$L = \partial_\mu \psi^* \cdot \partial^\mu \psi - m^2 \psi^* \psi, \tag{10.9}$$

式中 $m$ 是有量纲的常数. 把 $\psi$ 和 $\psi^*$ 看成描写场的独立变量(场的“广义坐标”$q$)，则不难看出拉格朗日方程

$$\frac{\partial}{\partial x^\mu} \frac{\partial L}{\partial q_{,\mu}} = \frac{\partial L}{\partial q} \tag{10.10}$$

① 相应的二次量子化算符 $\hat{L}$ 叫做场的拉格朗日量. 为了简化术语，不管是对“量子化的”还是对“非量子化的”拉格朗日函数密度，我们将都用拉格朗日量这个术语.

($q_{,\mu}\equiv\partial_\mu q$)实际上就是关于 $\psi$ 和 $\psi^*$ 的方程(10.5)，而且 $m$ 是粒子的质量. 我们还看到，表达式(10.9)中的符号取法应使对时间微商的平方 $|\partial\psi/\partial t|^2$ 在 $L$ 中具有正号；否则，作用量不可能具有最小值(比较第二卷 § 27). $L$ 中数值因子的选择是任意的（只影响 $\psi$ 的归一化系数）.

现在按照公式

$$T_\mu^\nu=\sum q_{,\mu}\frac{\partial L}{\partial q_{,\nu}}-L\delta_\mu^\nu \tag{10.11}$$

计算能量-动量张量(对所有的 $q$ 求和). 把式(10.9)代入，我们得到

$$T_{\mu\nu}=\partial_\mu\psi^*\cdot\partial_\nu\psi+\partial_\nu\psi^*\cdot\partial_\mu\psi-Lg_{\mu\nu} \tag{10.12}$$

(既然 $L$ 是实数，这些量自然都是实数)，其中

$$T_{00}=2\frac{\partial\psi^*}{\partial t}\frac{\partial\psi}{\partial t}-L=\frac{\partial\psi^*}{\partial t}\frac{\partial\psi}{\partial t}+\nabla\psi^*\cdot\nabla\psi+m^2\psi^*\psi, \tag{10.13}$$

$$T_{i0}=\frac{\partial\psi^*}{\partial t}\frac{\partial\psi}{\partial x^i}+\frac{\partial\psi^*}{\partial x^i}\frac{\partial\psi}{\partial t}. \tag{10.14}$$

场的四维动量由积分

$$P_\mu=\int T_{\mu 0}\mathrm{d}^3x \tag{10.15}$$

给出，即 $T_{00}$ 和 $T_{0i}$ 起着能量密度和动量密度的作用. 我们看到，量 $T_{00}$ 必然是正的.

公式(10.13)可以用来对波函数归一化. 一列归一化为“体积 $V=1$ 中有一个粒子”的平面波可以写成如下形式:

$$\psi_p=\frac{1}{\sqrt{2\varepsilon}}\mathrm{e}^{-ipx}. \tag{10.16}$$

由于这个函数的 $T_{00}=\varepsilon$，因而 $V=1$ 的体积中的总能量等于一个粒子的能量.

角动量守恒与空间的各向同性相关. 我们也可以把角动量表示成空间积分的形式，不过这种形式以后并不需要.

最后,除了直接与空间-时间对称性相联系的守恒定律外，方程(10.4)还容许一个守恒定律．实际上不难看到，由于式(10.4)(以及关于 $\psi^*$ 的同样的方程)可得方程

$$\partial_\mu j^\mu=0, \tag{10.17}$$

这里

$$j_\mu=m(\psi^*\psi_\mu+\psi^*_\mu\psi)=\mathrm{i}[\psi^*\partial_\mu\psi-(\partial_\mu\psi^*)\psi]. \tag{10.18}$$

由此可见，$j^\mu$ 起着四维流密度矢量的作用．这时，(10.17)是表达量

$$Q=\int j_0\mathrm{d}^3x \tag{10.19}$$

的守恒定律的连续性方程，式中

$$j_0=j^0=\mathrm{i}\left(\psi^*\frac{\partial\psi}{\partial t}-\frac{\partial\psi^*}{\partial t}\psi\right). \tag{10.20}$$

请注意，$j_0$ 不一定是正量．这表明，$j_0$ 一般不能解释成粒子空间位置的几率密度．方程(10.17)所表达的守恒定律的意义将在下一节阐述．

## § 11. 粒子和反粒子

按照二次量子化方法的一般步骤，我们必须把任意波函数按一个自由粒子全部可能状态的本征函数展开，例如，按平面波 $\psi_p$ 展开：

$$\psi=\sum_p a_p\psi_p,\qquad \psi^*=\sum_p a_p^*\psi_p.$$

然后把系数 $a_p, a_p^*$ 理解成粒子在对应状态中的湮灭算 $\hat{a}_p$ 和产生算符 $\hat{a}_p^+$①.

① 由于后面要把“负频率”的函数记作 $\psi_{-p}$，我们在这里用四维动量 $p$ 作 $\psi$ 函数的下标．我们用三维动量 $\boldsymbol{p}$ 作算符$\hat{a}$，$\hat{a}^+$的下标，因为 $\boldsymbol{p}$ 能完全决定真实粒子的状态.

但是，这里随即出现一个新的(与非相对论性理论比较)原则性问题. 在作为方程(10. 5)的解的平面波中，能量 $\varepsilon$(当动量 $\boldsymbol{p}$ 为一定时)只需满足条件 $\varepsilon^2=p^2+m^2$，即可能有两个值：$\pm\sqrt{\boldsymbol{p}^2+m^2}$. 作为自由粒子的能量，只有正的 $\varepsilon$ 值才有物理意义. 但是，简单地舍去这个负值也是不容许的：波动方程的通解只能通过叠加它的全部独立特解而得到. 这种情况表明，必须对 $\psi$ 和 $\psi^*$ 的二次量子化展开式系数作一些不同的解释.

我们把这个展开式写成

$$\psi=\sum_{\boldsymbol{p}}\frac{1}{\sqrt{2\varepsilon}}a_{\boldsymbol{p}}^{(+)}\mathrm{e}^{\mathrm{i}(\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{r}-\varepsilon t)}+\sum_{\boldsymbol{p}}\frac{1}{\sqrt{2\varepsilon}}a_{\boldsymbol{p}}^{(-)}\mathrm{e}^{\mathrm{i}(\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{r}+\varepsilon t)},\qquad(11.\ 1)$$

式中第一个求和号下是按照(10. 16)归一化的正"频率"的平面波，而第二个求和号下是负"频率"的平面波，$\varepsilon$ 一直代表正量 $+\sqrt{\boldsymbol{p}^2+m^2}$. 进行二次量子化时，第一个求和中的系数 $a_{\boldsymbol{p}}^{(+)}$ 通常由粒子的湮灭算符 $\hat{a}_{\boldsymbol{p}}$ 代替. 至于第二个求和，在以后导出矩阵元时将会看到，其中各项的时间关系不是对应粒子的湮灭，而是对应粒子的产生：因子 $\mathrm{e}^{\mathrm{i}\varepsilon t}=(\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\varepsilon t})^*$ 对应终态中一个能量为 $\varepsilon$ 的额外粒子(与 § 2 末比较). 与此相应，系数 $a_{\boldsymbol{p}}^{(-)}$ 由别的某种粒子的产生算符 $\hat{b}_{-\boldsymbol{p}}^{+}$ 代替. 如果将(11. 1)中第二个求和改为对 $-\boldsymbol{p}$ 进行，以使指数因子具有 $\mathrm{e}^{-\mathrm{i}(\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{r}-\varepsilon t)}$ 的形式，就得到如下形式的 $\psi$ 算符：

$$\begin{aligned}\hat{\psi}&=\sum_{\boldsymbol{p}}\frac{1}{\sqrt{2\varepsilon}}(\hat{a}_{\boldsymbol{p}}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}px}+\hat{b}_{\boldsymbol{p}}^{+}\mathrm{e}^{\mathrm{i}px}),\\ \hat{\psi}^{+}&=\sum_{\boldsymbol{p}}\frac{1}{\sqrt{2\varepsilon}}(\hat{a}_{\boldsymbol{p}}^{+}\mathrm{e}^{\mathrm{i}px}+\hat{b}_{\boldsymbol{p}}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}px}).\end{aligned}\qquad(11.\ 2)$$

可以看出，所有的算符 $\hat{a}_{\boldsymbol{p}},\hat{b}_{\boldsymbol{p}}$ 都与"正确的"时间相关函数($\sim\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\varepsilon t}$)相乘，而 $\hat{a}_{\boldsymbol{p}}^{+},\hat{b}_{\boldsymbol{p}}^{+}$ 与它们的复共轭函数相乘. 这样就与一般规则相符合，可以把算符 $\hat{a}_{\boldsymbol{p}}$，$\hat{b}_{\boldsymbol{p}}$ 解释成具有动量 $\boldsymbol{p}$ 和能量 $\varepsilon$ 的粒子的湮灭算符，而 $\hat{a}_{\boldsymbol{p}}^{+},\hat{b}_{\boldsymbol{p}}^{+}$ 为这些粒子的产生算符.

这样一来，我们得到两类同时且平等地出现的粒子的概念. 这两类粒子分别叫做**粒子**和**反粒子**(这个名称的意义将在下面谈到). 一类对应于二次量子化算符 $a_p, a_p^+$，另一类对应于 $b_p, b_p^+$. 既然两类粒子的算符出现在同一个 $\psi$ 算符中，它们就具有相同的质量.

我们也可以从相对论不变性的观点出发来研究这些结果.

从数学上讲，洛伦兹变换是包括改变时间轴方向的四维坐标系的转动(这些转动与不涉及时间轴的纯空间转动一起，组成一个变换群，叫**洛伦兹群**①). 所有洛伦兹变换都不会使 $t$ 轴超出相应的光锥. 这表达了一个物理原理——存在着信号传播的极限速度.

既然四维反演的变换行列式与其它转动变换的行列式一样等于 $+1$，那么，同时改变四个坐标的符号在纯数学的意义上也是一个转动. 这时，时间轴从一个光锥转向另一个光锥. 此种情况虽然意味着这样的变换(作为参考系的变换)在物理上是不可能的，但是从数学方面来讲，差别仅仅是：由于度规是伪欧几里德的，如果没有坐标的复变换伴随，这样的转动就不可能实现.

自然可以认为，这种差别对四维不变性并不重要. 对洛伦兹变换不变的任何表达式对四维反演也应不变. 对于标量 $\psi$ 算符，这一要求的确切表述将在§13给出. 我们在这里可以看出的是，既然代换 $t \to -t$ 改变指数中 $\varepsilon$ 的符号，$\psi$ 算符无疑就要同时存在两项($\varepsilon$ 的符号不同的两项).

现在让我们回到表达式(11.2)，以确定算符 $a_p, a_p^+$(和 $b_p, b_p^+$)之间的对易关系. 对于光子，是根据与谐振子的相似性(实质上是根据电磁场在经典极限情形下的性质)得到算符 $c_p$，$c_p^+$ 的对易关

① 所有三维(空间)转动的集合本身组成一个群，它是洛伦兹群的子群. 洛伦兹变换的集合本身并不是一个群，这是因为，连续进行洛伦兹变换的结果，可以是一个纯粹的空间转动.

系．现在没有这样的相似性．为了确定(玻色或费米)算符的对易定则，我们可以遵循的只有由这些算符建立起来的哈密顿算符的形式．

用 $\hat{\psi}$ 和 $\hat{\psi}^+$ 代替积分 $\int T_{00}d^3x$ 中的 $\psi$ 和 $\psi^*$①，就能得到哈密顿算符(参看第三卷 § 64)．由此我们求出

$$\hat{H}=\sum_p \varepsilon(\hat{a}_p^+\hat{a}_p+\hat{b}_p\hat{b}_p^+). \tag{11.3}$$

不难看出，为了使这个哈密顿算符的本征值具有合理的结果，只有假定算符满足玻色对易定则：

$$\{\hat{a}_p,\hat{a}_p^+\}_-=\{\hat{b}_p,\hat{b}_p^+\}_-=1 \tag{11.4}$$

(其它各对算符都对易，其中包括粒子的全部算符 $\hat{a}_p,\hat{a}_p^+$ 和反粒子的全部算符 $\hat{b}_p,\hat{b}_p^+$ 对易)．实际上，在这种情况下，

$$\hat{H}=\sum_p \varepsilon(\hat{a}_p^+\hat{a}_p+\hat{b}_p^+\hat{b}_p+1).$$

乘积 $\hat{a}_p^+\hat{a}_p$ 和 $\hat{b}_p^+\hat{b}_p$ 的本征值等于正整数 $N_p$ 和 $\bar{N}_p$——粒子数和反粒子数．无限个相加常数 $\Sigma\varepsilon$(“真空能量”)可以再次删去：

$$E=\sum_p \varepsilon(N_p+\bar{N}_p) \tag{11.5}$$

[与公式(3.1)及其注解比较]．这个表达式本质上是明确的，对应着两种实际存在的粒子．类似地，我们得到粒子系统的总动量

$$\mathbf{P}=\sum_p \mathbf{p}(N_p+\bar{N}_p). \tag{11.6}$$

如果我们用费米对易关系代替式(11.4)(用反对易子代替对

① 在非相对论性理论中，习惯上把共轭算符 $\hat{\psi}^+$ 写在 $\psi$ 的左边．此处顺序无关紧要，因为 $\hat{\psi}^+$ 和 $\psi$ 的交换只引起等效算符 $\hat{a}_p$ 和 $\hat{b}_p$ 的交换．但是，某种顺序一经选定，就必须始终遵循．

易子)，将会得到

$$\hat{H}=\sum_{p}\varepsilon(\hat{a}_p^+\hat{a}_p-\hat{b}_p^+\hat{b}_p+1),$$

这时，代替式(11.5)的是没有任何物理意义的表达式$\Sigma\varepsilon(N_p-\bar{N}_p)$；这个表达式不是正定的,因而不可能是自由粒子系统的能量.

由此可见,零自旋粒子是玻色子.

下面我们来研究式(10.19)的积分$Q$. 用算符$\hat{\psi}$和$\hat{\psi}^+$代替$j^0$函数中的$\psi$和$\psi^*$并进行积分,可得到

$$\hat{Q}=\sum_{p}(\hat{a}_p^+\hat{a}_p-\hat{b}_p\hat{b}_p^+)=\sum_{p}(\hat{a}_p^+\hat{a}_p-\hat{b}_p^+\hat{b}_p-1), \quad (11.7)$$

这个算符的本征值(略去无关紧要的相加常数$\Sigma 1$)是

$$Q=\sum_{p}(N_p-\bar{N}_p), \quad (11.8)$$

即等于粒子总数和反粒子总数之差.

只要我们研究的是自由粒子而不考虑它们之间的任何作用，量$Q$的守恒定律就仍然在一定意义上是有条件地成立的：这时总能量(11.5)和总动量(11.6)守恒定律也是一样. 不仅是总和$Q$，而且每一个数$N_p$，$\bar{N}_p$实际上都守恒. 存在相互作用时量$Q$是否还守恒，这取决于相互作用的性质. 如果$Q$守恒(即算符$\hat{Q}$与相互作用的哈密顿算符对易)，则表达式(11.8)表明了这个守恒定律对粒子数的可能改变所加的限制：只可能是“粒子＋反粒子”对产生和湮灭.

如果粒子带电，则它的反粒子应该带相反的电荷. 如果粒子和反粒子的电荷相同，它们成对地产生或湮灭就与严格的自然定律——总电荷守恒相抵触. 下面(§32)我们将看到，当粒子与电磁场相互作用时，理论如何自动地得出这种电荷的相反性.

量$Q$常常称为该粒子场的**电荷**. 对带电粒子来说，$Q$给出系

统的总电荷(以基本电荷 $e$ 为单位). 但是我们要强调指出，粒子和反粒子也可以是电中性的.

这样，我们看到，能量和动量的相对论性关系的性质(方程 $\varepsilon^2=p^2+m^2$ 的根的双值性)与相对论不变性的要求一起，在量子理论中导致一个粒子分类的新原理：可能存在着各种不同的粒子对(粒子＋反粒子)，它们按上面所描述的方式相互关联. 这个著名的预言是狄拉克 1930 年(对自旋 1/2 粒子)首次做出的，当时第一个反粒子——正电子还没有发现①.

## § 12. 真中性粒子

对 $\psi$ 函数(11.1)进行二次量子化时，系数 $a_p^{(+)}$ 和 $a_p^{(-)}$ 被看成不同粒子的算符. 但这并不是必需的. 在特定情况下，$\hat{\psi}$ 中所含的湮灭算符和产生算符可以属于同一种粒子. 比较式(2.17)可知，光子的情况就是如此. 这时，用 $\hat{c}_p$ 和 $\hat{c}_p^+$ 分别表示湮灭算符和产生算符，$\psi$ 算符可以写成

$$\hat{\psi}=\sum_p\frac{1}{\sqrt{2\varepsilon}}(\hat{c}_p e^{-ipx}+\hat{c}_p^+ e^{ipx}). \tag{12.1}$$

用这种算符所描述的场，是仅由一种粒子组成的系统. 因此可以说，这种粒子"与自己的反粒子相同".

算符(12.1)是厄密的($\hat{\psi}^+=\hat{\psi}$). 这样的场与($\hat{\psi}$ 和 $\hat{\psi}^+$ 不相同的)复场比较，自由度减少了一半.

因此，用厄密算符 $\hat{\psi}$ 所表示的场，其拉格朗日算符应多一个 1/2 因子[与式(10.9)比较]②:

---

① 反粒子的概念由 Weisskopf 和泡利推广应用于玻色子 (V. Weisskopf, W. Pauli, 1934).

② 将电磁场的能量密度算符 (2.10)(用厄密算符 $\boldsymbol{E}$ 和 $\boldsymbol{H}$ 表示)与光子的能量密度(3.2)(用复波函数表示)比较，就会发现这里也有类似的额外因子 1/2. 参看 § 3 的注解.

$$\hat{L}=\frac{1}{2}(\partial_\mu\hat{\psi}\cdot\partial^\mu\hat{\psi}-m^2\hat{\psi}^2). \tag{12.2}$$

相应的能量-动量张量为

$$\hat{T}_{\mu\nu}=\partial_\mu\hat{\psi}\cdot\partial_\nu\hat{\psi}-\hat{L}g_{\mu\nu}, \tag{12.3}$$

因而能量密度算符为

$$\hat{T}_{00}=\left(\frac{\partial\hat{\psi}}{\partial t}\right)^2-\hat{L}=\frac{1}{2}\left[\left(\frac{\partial\hat{\psi}}{\partial t}\right)^2+(\nabla\hat{\psi})^2+m^2\hat{\psi}^2\right]. \tag{12.4}$$

把式(12.1)代入积分$\int\hat{T}_{00}\mathrm{d}^3x$，就得到场的哈密顿算符

$$\hat{H}=\frac{1}{2}\sum_p\varepsilon(\hat{c}_p^+\hat{c}_p+\hat{c}_p\hat{c}_p^+). \tag{12.5}$$

由此，再一次看到玻色量子化的必要性：

$$\{\hat{c}_p,\hat{c}_p^+\}_-=1 \tag{12.6}$$

和能量本征值(再次略去相加常数)

$$E=\sum_p\varepsilon_p N_p. \tag{12.7}$$

而费米量子化将导致不合理的结果——$E$ 值与 $N_p$ 无关.

用反粒子代换粒子时$Q$要改变符号，而现在粒子和反粒子一样，所以很明显，这种场的“电荷”$Q$等于零. 既然当 $\hat{\psi}=\hat{\psi}^+$ 时，守恒的四维矢量算符

$$j_\mu=\mathrm{i}[\hat{\psi}^+\partial_\mu\hat{\psi}-(\partial_\mu\hat{\psi}^+)\hat{\psi}] \tag{12.8}$$

为零(矢量 $\hat{\psi}\partial_\mu\hat{\psi}$ 本身不守恒)，因此，四维电流密度矢量也就不存在. 这又意味着没有特别的守恒定律限制粒子数的可能改变. 显然，这样的粒子是电中性的.

我们称这种粒子为真中性粒子，以便与具有反粒子的电中性粒子相区别. 后者只能成对地湮灭(转化成光子)，而真中性粒子可以单个湮灭.

$\psi$ 算符(12.1)的结构跟电磁场算符(2.17)—(2.20)的结构类

似. 在这个意义上说,光子本身就是真中性粒子. 对电磁场,算符的厄密性与场强的可测量性(在经典极限下)——因而也是它的实在性——相联系. 而对粒子的 $\psi$ 算符,这样的联系不再存在,因为它们一般并不对应任何直接可测的物理量.

不存在守恒的四维流矢量,这是真中性粒子的普遍性质,与自旋是否为零无关(例如,光子就是如此). 在物理上,这表示对于粒子数的改变不存在相应的禁戒. 从形式上看,守恒流不存在是与场的实在性(即算符 $\hat{\psi}$ 的厄密性)有直接联系的.

复场的拉格朗日量

$$\hat{L}=\partial_\mu\hat{\psi}^+\cdot\partial^\mu\hat{\psi}-m^2\hat{\psi}^+\hat{\psi} \tag{12.9}$$

对 $\psi$ 算符乘以任意相因子的变换

$$\hat{\psi}\longrightarrow e^{i\alpha}\hat{\psi},\qquad \hat{\psi}^+\longrightarrow e^{-i\alpha}\hat{\psi}^+ \tag{12.10}$$

是不变的(这种变换叫**规范变换**). 特别是, 拉格朗日量在无限小规范变换

$$\hat{\psi}\longrightarrow\hat{\psi}+i\delta\alpha\cdot\hat{\psi},\qquad \hat{\psi}^+\longrightarrow\hat{\psi}^+-i\delta\alpha\cdot\hat{\psi}^+ \tag{12.11}$$

下是不变的.

当"广义坐标" $q$ 有一无限小变化时, 拉格朗日量经历如下变化

$$\delta\hat{L}=\Sigma\left(\frac{\partial\hat{L}}{\partial q}\delta q+\frac{\partial\hat{L}}{\partial q_{,\mu}}\delta q_{,\mu}\right)$$

$$=\Sigma\left(\frac{\partial\hat{L}}{\partial q}-\frac{\partial}{\partial x^\mu}\frac{\partial\hat{L}}{\partial q_{,\mu}}\right)+\Sigma\frac{\partial}{\partial x^\mu}\left(\frac{\partial\hat{L}}{\partial q_{,\mu}}\delta q\right)$$

(对所有的 $q$ 求和). 第一项因"运动方程"(拉格朗日方程)而为零. 如果取算符 $\hat{\psi}$ 和 $\hat{\psi}^+$ 为"坐标" $q$, 且

$$\delta\hat{\psi}=i\delta\alpha\cdot\hat{\psi},\qquad \delta\hat{\psi}^+=-i\delta\alpha\cdot\hat{\psi}^+,$$

我们得到

$$\delta\hat{L}=i\delta\alpha\frac{\partial}{\partial x^\mu}\left(\hat{\psi}\frac{\partial\hat{L}}{\partial\hat{\psi}_{,\mu}}-\hat{\psi}^+\frac{\partial\hat{L}}{\partial\hat{\psi}^+_{,\mu}}\right).$$

由此可见，拉格朗日算符不变($\delta\hat{L}=0$)的条件，等价于四维矢量

$$\hat{j}^{\mu}=\mathrm{i}\left(\hat{\psi}^{+}\frac{\partial\hat{L}}{\partial\hat{\psi}^{+}_{,\mu}}-\hat{\psi}\frac{\partial\hat{L}}{\partial\hat{\psi}_{,\mu}}\right) \tag{12.12}$$

的连续性方程($\partial_{\mu}\hat{j}^{\mu}=0$)．不难看出，对拉格朗日量(12.9)应用这个公式，就可以导出流(12.8)式．

这样，在理论的数学表述上，守恒流的存在与拉格朗日量在规范变换下的不变性相关(W. Pauli, 1941)，而真中性场的拉格朗日量(12.2)不具有这种对称性．

## §13. $C,P,T$ 变换

与四维反演不同，三维(空间)反演不能化为四维坐标系的任何转动．这个变换的行列式不是$+1$，而是$-1$．因而，在反演($P$变换)下粒子的对称性已不能由相对论不变性确定[①]．

对标量波函数进行反演运算就是变换

$$\hat{P}\psi(t,\boldsymbol{r})=\pm\psi(t,-\boldsymbol{r}), \tag{13.1}$$

等式右边的符号“+”或“−”分别对应真标量或赝标量．

由此可见，必须把反演变换下波函数行为的两个方面区分开来，其中的一个方面与波函数对坐标的依存相关．在非相对论性量子力学中只研究这个方面，并由此引出描述粒子运动对称性的宇称概念(我们在这里称它为**轨道宇称**)．如果状态具有一定的轨道宇称($+1$或$-1$)，这就意味着

$$\psi(t,-\boldsymbol{r})=\pm\psi(t,\boldsymbol{r}).$$

另一个方面是坐标轴反演时波函数在给定点(为方便起见，取这点为坐标原点)上的行为，由此引出粒子**内禀宇称**的概念．对于零自旋粒子，式(13.1)中的两种符号对应于内禀宇称$+1$或$-1$.

① 包含空间反演的洛伦兹群叫**扩展洛伦兹群**(以区别不包含$P$的原群；在这个意义上，原群被称为**正洛伦兹群**)．扩展群包括了使$t$轴仍留在相应光锥中的所有变换．

粒子系统的总宇称是它们的内禀宇称和相对运动的轨道宇称的乘积.

各种粒子的"内禀"对称性只在这些粒子的相互转变过程中才显现出来. 在非相对论性量子力学中, 和内禀宇称类似的东西是一个复合系统(例如原子核)的束缚态的宇称. 在相对论性理论中, 复合粒子和基本粒子之间没有原则上的区别, 因此它们的内禀宇称和那些在非相对论性理论中基本粒子的内禀宇称没有什么不同. 在非相对论范围内,基本粒子被认为是不可改变的,观察不到它们的内禀对称性,因而讨论内禀对称性就失去物理意义.

在二次量子化中,内禀宇称由反演变换下 $\psi$ 算符的行为表示. 与标量场和赝标量场对应的变换规则是

$$P: \ \hat{\psi}(t, \boldsymbol{r}) \longrightarrow \pm \hat{\psi}(t, -\boldsymbol{r}). \tag{13.2}$$

反演变换对 $\psi$ 算符的作用应该表述成粒子湮灭算符和产生算符的一个特定变换,这样的变换应能产生(13.2)的结果. 不难看出,这样的变换是

$$P: \ \hat{a}_{\boldsymbol{p}} \longrightarrow \pm \hat{a}_{-\boldsymbol{p}}, \quad \hat{b}_{\boldsymbol{p}} \longrightarrow \pm \hat{b}_{-\boldsymbol{p}} \tag{13.3}$$

(共轭算符也是这样). 实际上,在算符

$$\hat{\psi}(t, \boldsymbol{r}) = \sum_{\boldsymbol{p}} \frac{1}{\sqrt{2\varepsilon}} (\hat{a}_{\boldsymbol{p}} e^{-i\omega t + i\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{r}} + \hat{b}_{\boldsymbol{p}}^{+} e^{i\omega t - i\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{r}}) \tag{13.4}$$

中进行这种代换, 然后改写求和变量($\boldsymbol{p} \longrightarrow -\boldsymbol{p}$),就把它变成了 $\pm\hat{\psi}(t, -\boldsymbol{r})$的形式. 由此可见,如果用 $\hat{\psi}^{P}(t, \boldsymbol{r})$ 表示按(13.3)变换过的算符,就可以写出等式

$$\hat{\psi}^{P}(t, \boldsymbol{r}) = \pm \hat{\psi}(t, -\boldsymbol{r}). \tag{13.5}$$

既然反演改变极矢量 $\boldsymbol{p}$ 的符号, 使动量为 $\boldsymbol{p}$ 的粒子变成动量为 $-\boldsymbol{p}$ 的粒子,变换(13.3)就是完全合理的.

算符 $\hat{a}_{\boldsymbol{p}}$ 和 $\hat{b}_{\boldsymbol{p}}$ 按式(13.3)变换时,二者或都取上面的符号,或都取下面的符号. 在二次量子化中,这是粒子和反粒子(自旋为零

的)内禀宇称相同的表现．因为自旋为零的粒子和反粒子用同样的(标量或赝标量)波函数描述，显然它们有相同的内禀宇称．

在相对论性理论中，还有一种变换对称性是非相对论性理论中所没有的．这种变换叫**电荷共轭**($C$变换)．如果把所有的算符$\hat{a}_p$和$\hat{b}_p$交换：

$$\hat{C}:\ \hat{a}_p \longrightarrow \hat{b}_p,\quad \hat{b}_p \longrightarrow \hat{a}_p \tag{13.6}$$

(即粒子和反粒子互相取代)，那么$\hat{\psi}$变成“电荷共轭”算符$\hat{\psi}^C$，并且

$$\hat{\psi}^C(t,\boldsymbol{r}) = \hat{\psi}^+(t,\boldsymbol{r}). \tag{13.7}$$

这个等式表达了理论中粒子和反粒子概念的对称性．

我们看到，在电荷共轭变换的定义中存在着某种无关紧要的形式上的任意性．如果在式(13.6)的定义中引入一个任意的相因子

$$\hat{a}_p \longrightarrow e^{i\alpha}\hat{b}_p,\qquad \hat{b}_p \longrightarrow e^{-i\alpha}\hat{a}_p,$$

变换的意义并不改变．这时

$$\hat{\psi} \longrightarrow e^{i\alpha}\hat{\psi}^+,\qquad \hat{\psi}^+ \longrightarrow e^{-i\alpha}\hat{\psi},$$

若两次重复这个变换，将回到原状($\hat{\psi} \longrightarrow \hat{\psi}$)．然而所有这些定义都是互相等价的．由于$\psi$算符的性质不因乘以相因子而改变(与上节末比较)，所以我们可以把$\hat{\psi}$改写成$\hat{\psi}e^{i\alpha/2}$．这样，我们重又回到电荷共轭的定义(13.6)，(13.7)．

由于电荷共轭把粒子变成与它不同的反粒子，所以，在一般情况下不会有粒子或粒子系统的新性质出现．

由相同数目的粒子和反粒子组成的系统是一个例外．算符$\hat{C}$使这样的系统变换成它本身，因此在这种情况下，算符具有本征值为$C=\pm1$(由$\hat{C}^2=1$得出)的本征态．为了描写电荷对称性，我们可以把粒子和反粒子看成同一粒子的两个不同的“电荷状态”，区别在于电荷量子数$Q=\pm1$．系统的波函数是轨道函数和“电荷”

函数的乘积，并且当同时交换任一对粒子的所有变量(坐标和电荷)时，该波函数是对称的．“电荷”函数的对称性决定系统的电荷宇称(参看习题)①．

对“真中性”系统自然产生的电荷宇称概念，也应该适用于真中性的“基本”粒子．在二次量子化中，这个概念由等式

$$\hat{\psi}^C = \pm\hat{\psi} \tag{13.8}$$

描述，符号“+”和“-”分别对应电荷偶宇称粒子和电荷奇宇称粒子．

§11 中曾经指出，相对论不变性也应该意味着四维反演不变性．对于(四维转动意义上的)标量场算符，这意味着四维反演变换应该给出

$$\hat{\psi}(t, \boldsymbol{r}) \longrightarrow \hat{\psi}(-t, -\boldsymbol{r}),$$

右边总是带正号．用算符 $\hat{a}_p$, $\hat{b}_p$ 的变换术语来说，$\psi(t, \boldsymbol{r})$ 变成 $\hat{\psi}(-t, -r)$ 是通过交换(13.4)中 $e^{-ipx}$ 和 $e^{ipx}$ 的系数,即通过代换

$$\hat{a}_p \longrightarrow \hat{b}_p^+, \qquad \hat{b}_p \longrightarrow \hat{a}_p^+ \tag{13.9}$$

实现的．由于 $a$-算符变为 $b$-算符，这个变换包含着粒子变为反粒子．我们看到，在相对论性理论中，自然而然地要求在空间反演($P$)，时间反演($T$)和电荷共轭($C$)联合变换下的不变性，这叫做 **$CPT$ 定理**②．

然而，在这里要适当强调一下，虽然本节和§11，§12中的讨论是普通量子力学和经典相对论概念的自然发展，但是所得到的结论，不论在形式上(同时包含粒子的产生算符和湮灭算符的 $\psi$ 算符)，还是在本质上(粒子和反粒子)，都超出了普通量子力学和经典相对论的范围．因此，这些结论并不是纯粹逻辑上的必然，而是

---

① 我们在这里讨论的是零自旋粒子，但所用的方法可以直接推广到其它自旋的情形．作为例子，可参看§27的习题．

② 这个定理是由 G. Lüders(1954)和 W. Pauli(1955)阐明的．

包含着新的物理原理．这些原理的正确性只能用实验鉴定．

如果用 $\hat{\psi}^{CPT}(t,\boldsymbol{r})$ 表示经过变换(13.9)的算符(13.4)，那么可以写出：

$$\hat{\psi}^{CPT}(t,\boldsymbol{r})=\hat{\psi}(-t,-\boldsymbol{r}). \qquad (13.10)$$

这样一来，如果把四维反演表述成变换(13.9)，我们也就能对 $\psi$ 算符建立时间反演变换的表述：与 $CP$ 变换（称为组合反演）一起，它应该给出式(13.9)．考虑到定义(13.3)和(13.6)，我们求出

$$T:\ \hat{a}_{\boldsymbol{p}}\longrightarrow\pm\hat{a}^{+}_{-\boldsymbol{p}},\qquad \hat{b}_{\boldsymbol{p}}\longrightarrow\pm\hat{b}^{+}_{-\boldsymbol{p}} \qquad (13.11)$$

[符号±与式(13.3)中的符号对应]．这个变换的意义十分明显：时间反演不仅使动量为 $\boldsymbol{p}$ 的运动变成动量为 $-\boldsymbol{p}$ 的运动，而且也交换矩阵元中的初态和终态．因此，动量为 $\boldsymbol{p}$ 的粒子的湮灭算符由动量为 $-\boldsymbol{p}$ 的粒子的产生算符所代替．在式(13.4)中进行代换(13.11)并改写求和变量 $(\boldsymbol{p}\longrightarrow-\boldsymbol{p})$，我们得到①

$$\hat{\psi}^{T}(t,\boldsymbol{r})=\pm\hat{\psi}^{+}(-t,\boldsymbol{r}). \qquad (13.12)$$

这个等式类似于量子力学中时间反演的一般规则：如果某个状态用波函数 $\psi(t,\boldsymbol{r})$ 描述，则“时间反演”状态由函数 $\psi^{*}(-t,\boldsymbol{r})$ 描述．变成复共轭函数是因为：必须恢复因 $t$ 的符号改变而遭到破坏的“正确的”时间相关性(E. P. Wigner, 1932)．

既然变换 $T$（因而还有 $CPT$）变换初态和终态，它们就没有本征态和本征值，因而也就不能给粒子本身带来新的特性．它们应用于散射过程的推论，将在§69，§71中讨论．

现在我们来研究当进行 $C$、$P$ 和 $T$ 变换时，四维流矢量算符 $\hat{j}^{\mu}$(12.8)如何改变．变换(13.2)和代换 $(\partial_0,\partial_i)\longrightarrow(\partial_0,-\partial_i)$ 给出

$$P:\ (\hat{j}^{0},\hat{\boldsymbol{j}})_{t,\boldsymbol{r}}\longrightarrow(\hat{j}^{0},-\hat{\boldsymbol{j}})_{t,-\boldsymbol{r}}, \qquad (13.13)$$

① 如果定义运算 $T$ 时不考虑别的变换，那么相因子的选择就存在着任意性，这和定义运算 $C$ 的情况相同．$CPT$ 对称性的要求意味着，只能对变换 $C$ 或变换 $T$ 中的一个任意选择相因子．

这和真四维矢量的变换一样. 如果算符 $\hat{\psi}$ 和 $\hat{\psi}^+$ 对易, 则变换(13.7)只给出

$$C: (\hat{j}^0, \hat{\boldsymbol{j}})_{t,r} \longrightarrow (-\hat{j}^0, -\hat{\boldsymbol{j}})_{t,r}. \tag{13.14}$$

但是, 这些算符的不对易性仅仅是由于具有相同 $p$ 的算符 $\hat{a}_p$ 和 $\hat{a}_p^+$(或 $\hat{b}_p$ 和 $\hat{b}_p^+$)不对易. 从对易定则(11.4)可知, 交换这些算符只会出现与占有数(即与场的状态)无关的项. 略去这些无关紧要的项[如在式(11.5),(11.6)中那样], 重又回到规则(13.14). 它的物理意义很清楚: 当进行粒子-反粒子代换时,电荷共轭改变四维流所有分量的符号.

既然时间反演运算调换初态和终态, 它就要改变算符乘积中因子的次序. 例如,

$$(\hat{\psi}^+\partial_\mu\hat{\psi})^T = (\partial_\mu\hat{\psi})^T(\hat{\psi}^+)^T.$$

但在此处它并不重要: 由于 $\psi$ 算符(在上述意义上)对易, 使因子回到原来的次序对结果并没有影响. 又由于在时间反演时 $(\partial_0, \partial_i) \longrightarrow (-\partial_0, \partial_i)$, 我们求出流的变换规则

$$T: (\hat{j}^0, \hat{\boldsymbol{j}})_{t,r} \longrightarrow (\hat{j}^0, -\hat{\boldsymbol{j}})_{-t,r}. \tag{13.15}$$

三维矢量 $\boldsymbol{j}$ 改变符号,与这个量的经典意义相符.

最后,当进行 $CPT$ 变换时,我们有

$$CPT: (\hat{j}^0, \hat{\boldsymbol{j}})_{t,r} \longrightarrow (-\hat{j}^0, -\hat{\boldsymbol{j}})_{-t,-r} \tag{13.16}$$

与这种运算的四维反演的意义一致. 在这里必须强调, 由于四维反演就是四维坐标系的转动, 所以不存在两种类型的任意秩四维张量(真张量和赝张量).

以上我们研究的都是自由粒子. 当我们研究相互作用粒子时, 就有确定的选择定则与之相关, 这些选择定则允许或禁止一些特定的过程. 只有在这种情况下,宇称量子数才具有实在的意义. 但是,只有守恒特征值,即与相互作用粒子的哈密顿量相对易的算符

的本征值，才具有这种意义.

由于相对论不变性，$CPT$ 变换算符总是与哈密顿算符对易. 至于 $C$ 和 $P$（以及 $T$）的单独变换，实验表明，电磁相互作用和强相互作用是不变的，因而相应的宇称量子数在这些相互作用中守恒. 而在弱相互作用中，这些守恒定律遭到破坏①.

我们预先指出：带电粒子与电磁场的相互作用算符是四维矢量算符 $\hat{A}$ 和 $\hat{j}$ 的乘积. 既然电荷共轭改变 $\hat{j}$ 的符号，那么电磁相互作用对这种变换的不变性就意味着 $\hat{A}$ 的符号也必须改变. 换句话说，光子是奇电荷宇称粒子.

算符 $\hat{A}$ 的上述行为与经典理论中四维势的性质相符合. 实际上，由变换

$$C:\quad (\hat{A}_0, \hat{\mathbf{A}}) \longrightarrow (-\hat{A}_0, -\hat{\mathbf{A}})_{t,\mathbf{r}},$$

$$P:\quad (\hat{A}_0, \hat{\mathbf{A}}) \longrightarrow (\hat{A}_0, -\hat{\mathbf{A}})_{t,-\mathbf{r}},$$

$$CPT:\quad (\hat{A}_0, \hat{\mathbf{A}}) \longrightarrow (-\hat{A}_0, -\hat{\mathbf{A}})_{-t,-\mathbf{r}}$$

可以得出：

$$T:\quad (\hat{A}_0, \hat{\mathbf{A}}) \longrightarrow (A_0, -\hat{\mathbf{A}})_{-t,\mathbf{r}}$$

这与时间反演下电磁场势变换的经典规则相一致.

$CPT$ 不变性对粒子自身的性质没有任何限制，但是它在粒子和反粒子的性质之间建立了一定的联系. 首先，粒子和反粒子的质量相等. 只要回想一下 § 11 中阐明的粒子和反粒子概念的引入与四维反演之间的联系，这一点就是很清楚的.

其次，由 $CPT$ 不变性得出，粒子和反粒子的电矩和磁矩矢量与自旋矢量之间的比例系数只差一个符号. 实际上，磁矩在 $C$-变

① 弱相互作用中宇称可能不守恒的思想是李政道和杨振宁首先提出的（T. D. Lee, C. N. Yang, 1956）. 在这以前，狄拉克曾提出物理定律不一定具有 $P$ 不变性和 $T$ 不变性的一般思想（1949）.

换和 $T$-变换时要改变符号，因为它是轴矢量，对 $P$-变换却是不变的. 所以，$CPT$ 变换当把粒子变成反粒子的时候，同时并不改变磁矩的符号，而自旋矢量却要变号. 同样的道理，对于电矩来说，它在时间反演时不变号而在 $C$-变换时和在空间反演时（由于它是极矢量）要改变符号.

$P$ 不变性或 $T$ 不变性（如果遵守这种不变性的话）对每种粒子的性质都有限制：它们禁止粒子具有电偶极矩. 事实上，对静止的基本粒子来说，由它的 $\psi$ 算符所能组成的唯一矢量，就是它的自旋算符矢量. 这个矢量对 $P$ 变换呈偶性而对 $T$ 变换呈奇性，所以只能用它定义磁矩而不能用它定义电矩. 我们要着重指出，只要存在 $P$ 不变性和 $T$ 不变性中的一个，就足以产生这种禁戒.

### 习　题

设有由零自旋粒子和它的反粒子组成的二粒子系统，其相对运动的轨道角动量为 $l$，试确定此系统的电荷宇称和空间宇称.

**解**　交换二粒子的坐标等价于对质心的反演，所以可给轨道函数乘以 $(-1)^l$；交换电荷变量等价于电荷共轭，可令波函数中的“电荷”因子乘以所求的宇称 $C$. 根据条件 $C(-1)^l=1$，我们有

$$C=(-1)^l.$$

系统的空间宇称 $P$ 是二粒子的轨道宇称和内禀宇称之积. 因为粒子和反粒子的内禀宇称相同，所以在此情况下，$P$ 等于轨道宇称：

$$P=(-1)^l.$$

## §14. 自旋为 1 的粒子的波动方程

自旋为 1 的粒子在其静止参考系中用三分量波函数——三维矢量描述，这样的粒子常称为**矢量粒子**. 究其四维根源，这个矢量可以是四维类空矢量 $\psi^\mu$ 的三个空间分量，也或许是二秩的四维反对称张量 $\psi^{\mu\nu}$ 的混合分量. 在静止参考系中，$\psi^\mu$ 的时间分量（$\psi^0$）

和 $\psi^{\mu\nu}$ 的空间分量($\psi^{ik}$)为零[①].

波动方程是 $\psi^{\mu}$ 和 $\psi^{\mu\nu}$ 之间的微分关系，可以通过下面的两个关系式建立起来:

$$i\psi_{\mu\nu}=\hat{p}_{\mu}\psi_{\nu}-\hat{p}_{\nu}\psi_{\mu}, \tag{14.1}$$

$$im^{2}\psi_{\mu}=\hat{p}^{\nu}\psi_{\mu\nu}, \tag{14.2}$$

式中 $\hat{p}=i\partial$(A. Proca, 1936). 对方程(14.2)的两边施行运算 $\hat{p}^{\mu}$，(由于 $\psi_{\mu\nu}$ 的反对称性质)我们得到

$$\hat{p}^{\mu}\psi_{\mu}=0. \tag{14.3}$$

把方程(14.1)代入(14.2)，消去 $\psi_{\mu\nu}$，考虑到式(14.3)，我们得出:

$$(\hat{p}^{2}-m^{2})\psi_{\mu}=0, \tag{14.4}$$

从这里再次看到(与 § 10 比较)，$m$ 是粒子的质量. 由此可见，自旋为 1 的自由粒子可以用一个四维矢量 $\psi^{\mu}$ 描写，它的分量满足二阶方程(14.4) 以及补充条件(14.3). 后者从 $\psi^{\mu}$ 中消去了属于零自旋的部分.

在静止参考系中，$\psi_{\mu}$ 与空间坐标无关，我们求出：$\hat{p}^{0}\psi_{0}=0$. 又由于 $\hat{p}^{0}\psi_{0}=m\psi_{0}$，因此我们看到，在静止参考系中，果然 $\psi_{0}=0$，$\psi_{ik}$ 也为零.

自旋为 1 的粒子可以具有不同的内禀宇称，由 $\psi^{\mu}$ 是真矢量还是赝矢量决定. 在真矢量的情况下，

$$P\psi^{\mu}=(\psi^{0},-\psi^{i}),$$

而在赝矢量的情况下，

$$P\psi^{\mu}=(-\psi^{0},\psi^{i}).$$

方程(14.1)，(14.2)可以利用拉格朗日函数

---

① 我们预先指出，四维矢量 $\psi_{\mu}$ 和四维张量 $\psi^{\nu\mu}$ 的集合对应着二秩四维旋量 $\xi^{\alpha\beta}$，$\eta_{\dot{\alpha}\dot{\beta}}$，$\xi^{\alpha\dot{\beta}}$ 的集合，并且 $\xi^{\alpha\beta}$ 和 $\eta_{\dot{\alpha}\dot{\beta}}$ 是反演变换下可以互相转换的对称旋量(参看 § 19).

$$L=\frac{1}{2}\psi_{\mu\nu}\psi^{\mu\nu*}-\frac{1}{2}\psi^{\mu\nu*}(\partial_\mu\psi_\nu-\partial_\nu\psi_\mu)$$

$$-\frac{1}{2}\psi^{\mu\nu}(\partial_\mu\psi_\nu^*-\partial_\nu\psi_\mu^*)+m^2\psi_\mu\psi^{\mu*} \qquad (14.5)$$

由变分原理得到. $\psi_\mu$, $\psi_\mu^*$, $\psi_{\mu\nu}$, $\psi_{\mu\nu}^*$ 在式中起独立广义坐标的作用①.

为了求出能量-动量张量，公式(10.11)在这里并不十分合适，这是因为它会引进一个需要进一步对称化的非对称张量. 作为代替，可以利用公式

$$\frac{1}{2}T_{\mu\nu}\sqrt{-g}=-\frac{\partial}{\partial x^\lambda}\frac{\partial\sqrt{-g}L}{\partial g^{\mu\nu}_{,\lambda}}+\frac{\partial\sqrt{-g}L}{\partial g^{\mu\nu}}, \qquad (14.6)$$

在这个公式中，假设 $L$ 被表达成对任意曲线坐标都合适的形式(参看第二卷 § 94). 如果 $L$ 只包含度规张量 $g_{\mu\nu}$ 的分量（而没有这些分量对坐标的微商)，则公式简化为

$$T_{\mu\nu}=\frac{2}{\sqrt{-g}}\frac{\partial\sqrt{-g}L}{\partial g^{\mu\nu}}=2\frac{\partial L}{\partial g^{\mu\nu}}-g_{\mu\nu}L$$

(因为 $\mathrm{d}\ln g=-g_{\mu\nu}\mathrm{d}g^{\mu\nu}$).

由于公式(14.6)中不是对 $\psi_\mu$, $\psi_{\mu\nu}$ 求导，在应用此式时就不必认为这些量是独立的. 我们可以直接利用关系式(14.1)把拉格朗日函数(14.5)改写成

$$L=-\frac{1}{2}\psi_{\mu\nu}\psi^*_{\lambda\rho}g^{\mu\lambda}g^{\nu\rho}+m^2\psi_\mu\psi^*_\nu g^{\mu\nu}, \qquad (14.7)$$

这时

$$T_{\mu\nu}=-\psi_{\mu\lambda}\psi_\nu^{\ \lambda*}-\psi^*_{\mu\lambda}\psi_\nu^{\ \lambda}+m^2(\psi_\mu^*\psi_\nu+\psi_\nu^*\psi_\mu)$$

$$+g_{\mu\nu}\left(\frac{1}{2}\psi_{\lambda\rho}\psi^{\lambda\rho*}-m^2\psi_\lambda^*\psi^\lambda\right), \qquad (14.8)$$

其中，能量密度表达式

① 如果我们只对 $\psi_\mu$ 进行变分［假定 $\psi_{\mu\nu}$ 已按照 (14.1) 用 $\psi_\mu$ 表达]，则方程(14.3)作为与变分原理无关的附加条件应该是必需的.

$$T_{00}=\frac{1}{2}\psi_{ik}\psi_{ik}^{*}+\psi_{0i}\psi_{0i}^{*}+m^2(\psi_0\psi_0^{*}+\psi_i\psi_i^{*}) \qquad (14.9)$$

必然是正的．守恒的四维流密度矢量表达式为

$$j^{\mu}=\mathrm{i}(\psi^{\mu\nu *}\psi_{\nu}-\psi^{\mu\nu}\psi_{\nu}^{*}). \qquad (14.10)$$

这个结果可以按照公式(12.12)将拉格朗日函数(14.5)对导数$\partial_{\mu}\psi_{\nu}$微分得出，其中

$$j^{0}=\mathrm{i}(\psi^{0k *}\psi_{k}-\psi^{0k}\psi_{k}^{*}) \qquad (14.11)$$

实际上不是一个正量．

归一化为体积$V=1$中有一个粒子的平面波为

$$\psi_{\mu}=\frac{1}{\sqrt{2\varepsilon}}u_{\mu}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}px},\quad u_{\mu}u^{\mu *}=-1 \qquad (14.12)$$

这里$u_{\mu}$是四维单位极化矢量，由于式(14.3)，它满足四维横向条件

$$u_{\mu}p^{\mu}=0. \qquad (14.13)$$

实际上，将函数(14.12)代入式(14.9)和(14.11)，我们得到

$$T_{00}=-2\varepsilon^2\psi_{\mu}\psi^{\mu *}=\varepsilon,\ j^0=1.$$

与光子不同，非零质量的矢量粒子有三个独立的极化方向，相应的振幅见式(16.21)．

对部分极化的矢量粒子，密度矩阵的定义应该使其在纯态中化为乘积

$$\rho_{\mu\nu}=u_{\mu}u_{\nu}^{*}$$

[类似于光子的表达式(8.7)]．按照式(14.12)和(14.13)，它满足条件

$$p^{\mu}\rho_{\mu\nu}=0,\ \rho_{\mu}^{\mu}=-1. \qquad (14.14)$$

对于非极化粒子，矩阵$\rho_{\mu\nu}$的形式应该是$ag_{\mu\nu}+bp_{\mu}p_{\nu}$．系数$a$和$b$由式(14.14)确定后，即得

$$\rho_{\mu\nu}=-\frac{1}{3}\left(g_{\mu\nu}-\frac{p_{\mu}p_{\nu}}{m^2}\right). \qquad (14.15)$$

矢量粒子场的量子化与标量的情形十分相似，毋须重复. 矢量场 $\psi$ 算符的形式是

$$\hat{\psi}_{\mu}=\sum_{p\alpha}\frac{1}{\sqrt{2\varepsilon}}(\hat{a}_{p\alpha}u_{\mu}^{(\alpha)}e^{-ipx}+\hat{b}_{p\alpha}^{+}u_{\mu}^{(\alpha)*}e^{ipx}),$$

$$\hat{\psi}_{\mu}^{+}=\sum_{p\alpha}\frac{1}{\sqrt{2\varepsilon}}(\hat{a}_{p\alpha}^{+}u_{\mu}^{(\alpha)*}e^{ipx}+\hat{b}_{p\alpha}u_{\mu}^{(\alpha)}e^{-ipx}), \tag{14.16}$$

其中 $\alpha$ 是三种独立极化的指标.

式(14.9) 表达的 $T_{00}$ 是正定的，而式(14.11)表达的 $j^0$ 却不是. 这些特点也像标量情形中那样，必定导致玻色量子化.

真中性矢量场的性质与电磁场的性质之间存在着密切的联系. 中性矢量场用厄密算符 $\psi$ 描述:

$$\hat{\psi}_{\mu}=\sum_{p\alpha}\frac{1}{\sqrt{2\varepsilon}}(\hat{c}_{p\alpha}u_{\mu}^{(\alpha)}e^{-ipx}+\hat{c}_{p\alpha}^{+}u_{\mu}^{(\alpha)*}e^{ipx}). \tag{14.17}$$

这个场的拉格朗日算符为

$$\hat{L}=\frac{1}{4}\hat{\psi}_{\mu\nu}\hat{\psi}^{\mu\nu}-\frac{1}{2}\hat{\psi}^{\mu\nu}(\partial_{\mu}\hat{\psi}_{\nu}-\partial_{\nu}\hat{\psi}_{\mu})+\frac{1}{2}m^2\hat{\psi}_{\mu}\hat{\psi}^{\mu}. \tag{14.18}$$

电磁场对应于 $m=0$. 这时四维矢量 $\psi^{\mu}$ 变成四维势 $A^{\mu}$，而四维张量 $\psi^{\mu\nu}$ 变成场的张量 $F^{\mu\nu}$；按照定义(14.1)，$F^{\mu\nu}$ 与势 $A^{\mu}$ 相关，方程(14.2)变成 $\partial^{\nu}\psi_{\mu\nu}=0$，对应着第二对麦克斯韦方程. 由它已不能够得出条件(14.3)，因此，式(14.3)已不再是必要的了. 由于不存在附加条件，不必把拉格朗日算符中的 $\hat{\psi}_{\mu}$ 和 $\hat{\psi}_{\mu\nu}$ 看成独立的"坐标"，拉格朗日算符(14.18)变为

$$\hat{L}=-\frac{1}{4}\hat{\psi}_{\mu\nu}\hat{\psi}^{\mu\nu}, \tag{14.19}$$

这与电磁场拉格朗日的著名经典表达式相一致. 和张量 $\hat{\psi}_{\mu\nu}$ 一样，这个拉格朗日算符对"势" $\psi_{\mu}$ 的任意规范变换都是不变的. 这种性质与零质量有明显的联系：拉格朗日量(14.18)因有一项 $m^2\hat{\psi}_{\mu}\hat{\psi}^{\mu}$ 而不具有这种性质.

## § 15. 具有最高整数自旋的粒子的波动方程

既然给出粒子的质量和自旋就能直接得出波动方程(14.3)和(14.4),那么拉格朗日量的实际应用与其说是导出这些方程,不如说是建立场的能量、动量和电荷的表达式.

为此,如前所述,我们可以应用表达式(14.7)以代替(14.5),再把(14.7)作如下的进一步变换. 利用式(14.1)可把式(14.7)改写成

$$
\begin{aligned}
L &= -(\partial_\mu \psi_\nu^*)(\partial^\mu \psi^\nu) + (\partial_\nu \psi_\mu^*)(\partial^\mu \psi^\nu) + m^2 \psi_\mu \psi^{\mu *} \\
&= -(\partial_\mu \psi_\nu^*)(\partial^\mu \psi^\nu) + m^2 \psi_\mu^* \psi^\mu + \partial_\nu(\psi_\mu^* \partial^\mu \psi^\nu) - \psi_\mu^* \partial^\mu \partial_\nu \psi^\nu.
\end{aligned}
$$

根据式(14.3),最后一项为零. 倒数第二项是全微商, 可以略去. 我们得到拉格朗日函数

$$
L' = -(\partial_\mu \psi_\nu^*)(\partial^\mu \psi^\nu) + m^2 \psi_\mu^* \psi^\mu. \tag{15.1}
$$

它与零自旋粒子的拉格朗日函数(10.9)具有相同的形式, 差别仅仅是用四维矢量 $\psi_\mu$ 代替标量 $\psi$ 并改变符号. 符号的改变是因为 $\psi_\mu$ 是类空矢量,因而 $\psi_\mu \psi^{\mu *} < 0$,而对于标量粒子,$\psi \psi^* > 0$.

如果用拉格朗日函数(15.1) 建立四维能量-动量张量和四维流矢量, 我们便得到与标量场的(10.12)和(10.18)形式相同的表达式:

$$
T_{\mu\nu} = -\partial_\mu \psi^{\lambda *} \cdot \partial_\nu \psi_\lambda - \partial_\nu \psi^{\lambda *} \cdot \partial_\mu \psi_\lambda - L' g_{\mu\nu}, \tag{15.2}
$$

$$
j_\mu = -i[\psi_\lambda^* \partial_\mu \psi^\lambda - (\partial_\mu \psi_\lambda^*) \psi^\lambda]. \tag{15.3}
$$

它们与式(14.8)和 (14.10)的区别也在于全微商. 但是前面已强调过,这些量的局部值没有深刻的物理意义. 重要的只是体积分 $P_\mu$ (10.15)和 $Q$(10.19), 它们对 $T_{\mu\nu}$ 和 $j_\mu$ 的两种选择都是一样的.

这样的描述方法可以直接推广到具有任意 (整数) 自旋的粒子. 自旋为 $s$ 的粒子的波函数是 $s$ 秩不可约四维张量, 即这个张量对它的所有指标都对称,对任意一对指标收缩时都为零:

$$\psi_{\cdots\mu\nu\cdots}=\psi_{\cdots\nu\cdots\mu},\ \psi_{\cdots\mu\cdots}{}^{\mu}{}_{\cdots}=0. \tag{15.4}$$

这个张量必须满足附加的四维横向条件:

$$p^{\mu}\psi_{\cdots\mu\cdots}=0, \tag{15.5}$$

它的每一个分量必须满足二阶方程:

$$(p^2-m^2)\psi_{\cdots}=0. \tag{15.6}$$

在静止参考系中，条件(15.5)意味着四维张量的所有含零指标的分量为零. 换句话说，静止参考系中(即在非相对论极限时)的波函数，本来就相当于 $s$ 秩不可约的三维张量，其独立分量的数目等于 $2s+1$.

对自旋为 $s$ 的粒子构成的场，拉格朗日函数、能量-动量张量和流矢量与式(15.1)—(15.3) 的差别仅仅是用 $\psi_{\lambda\mu\cdots}$ 代替了 $\psi_{\lambda}$.

归一化的平面波为

$$\psi^{\mu\nu\cdots}=\frac{1}{\sqrt{2\varepsilon}}u^{\mu\nu\cdots}e^{-ipx},\ u^*_{\mu\nu\cdots}u^{\mu\nu\cdots}=-1, \tag{15.7}$$

波的振幅满足条件

$$u^{\cdots\mu\cdots}p_{\mu}=0, \tag{15.8}$$

有 $2s+1$ 个独立的极化状态.

场的量子化显然可以从自旋为 0 或 1 的情形推广得到.

上述方法已足以描述自由粒子的场. 如果要描述粒子与电磁场的相互作用，情况就不同了. 要从拉格朗日函数得到全部方程式而毋须附加条件，拉格朗日函数必须包含相互作用. 但是在物理上，这样描述相互作用仅仅适用于电子——自旋为 1/2 的粒子(参看 §32). 因此，对于别的自旋值，这个问题只具有方法论的意义.

我们看到，对 $s>1$ 的所有(整数和半整数)自旋来说，仅用一个秩数与给定自旋值相对应的张量函数或旋量函数，不能表述最小作用量原理，还必须引入辅助的秩数较低的张量或旋量. 这时,

由于自由粒子的场方程是根据最小作用量原理得出的，拉格朗日函数的选择应使这些辅助量自动为零①.

## § 16. 粒子的螺旋性状态②

在相对论性理论中，运动粒子的轨道角动量 $\boldsymbol{l}$ 和自旋 $\boldsymbol{s}$ 分别都不守恒，只有总角动量 $\boldsymbol{j}=\boldsymbol{l}+\boldsymbol{s}$ 是守恒量. 因此，自旋在任何已知方向(取为 $z$ 轴)上的分量也不守恒，不能用来对运动粒子的极化(自旋)状态计数.

但是，自旋在动量方向上的分量守恒，这是因为 $\boldsymbol{l}=\boldsymbol{r}\times\boldsymbol{p}$，所以乘积 $\boldsymbol{s}\cdot\boldsymbol{n}$ 等于守恒的乘积 $\boldsymbol{j}\cdot\boldsymbol{n}$ ($\boldsymbol{n}=\boldsymbol{p}/|\boldsymbol{p}|$). 这个量叫**螺旋性**③(我们已在 § 8 中研究过光子的螺旋性)，它的本征值用字母 $\lambda$ ($\lambda=-s, \cdots, +s$) 表示. 粒子具有一定 $\lambda$ 值的状态叫螺旋性状态.

令 $\psi_{p\lambda}$ 为描述粒子的 $\boldsymbol{p}$ 和 $\lambda$ 值确定的状态的波函数(平面波) $u^{(\lambda)}(p)$ 是它的振幅. 为了简化符号，我们略去这个函数的分量指标(对整数自旋粒子，就是四维张量指标).

在前几节中我们看到，对非零(整数)自旋粒子做相对论性描述时，所引入的波函数的分量数必定大于 $2s+1$，但是独立的分量数仍旧等于 $2s+1$，"多余的"分量由附加条件消去. 在静止参考系中，附加条件使这些分量都为零(下一章我们将看到，这种情况对半整数 $s$ 也存在).

按照角动量变换公式 (参看第二卷 § 14)，在 $\boldsymbol{p}$ 方向(即角动量投影方向)不变的洛伦兹变换下，螺旋性也是不变的. 因而，在这种变换下，$\lambda$ 仍然是一个好的量子数. 为了研究螺旋性状态的

---

① 参看 Fierz M., Pauli W., *Proc. Roy. Soc.* A 173, 211, 1939. 这篇论文把上述方法应用于自旋为 3/2 和 2 的粒子.

② 本节讨论具有任意(整数或半整数)自旋的粒子.

③ 在俄语中叫 *спиральность*，而在英语文献中为 *helicity*.

对称性质，可以利用动量 $|\boldsymbol{p}|\ll m$ 的参考系（在极限情况下是静止参考系）．这时，$\psi_{p\lambda}$ 化为 $2s+1$ 个分量的非相对论性波函数，它的振幅用 $w^{\lambda}(\boldsymbol{n})$ 表示，自变量 $\boldsymbol{n}=\boldsymbol{p}/|\boldsymbol{p}|$ 为角动量量子化的方向．振幅 $w^{(\lambda)}$ 是算符 $\boldsymbol{n}\cdot\hat{\mathbf{s}}$ 的本征函数：

$$(\boldsymbol{n}\cdot\hat{\mathbf{s}})w^{(\lambda)}(\boldsymbol{n})=\lambda w^{(\lambda)}(\boldsymbol{n}). \tag{16.1}$$

在旋量表象中，$w^{(\lambda)}$ 是 $2s$ 秩逆变对称旋量．根据第三卷的对应公式(57.2)，它的分量也可以按照自旋在一固定 $z$ 轴上的分量 $\sigma$ 的相应值计算①．

在动量表象中，被研究状态的波函数与振幅 $u^{(\lambda)}(\boldsymbol{p})$ 必然相同，即

$$\psi_{p\lambda}(\boldsymbol{k})=u^{(\lambda)}(\boldsymbol{k})\delta^{(2)}(\boldsymbol{\nu}-\boldsymbol{n})=u^{(\lambda)}(\boldsymbol{p})\delta^{(2)}(\boldsymbol{\nu}-\boldsymbol{n}), \tag{16.2}$$

式中动量是独立变量，用 $\boldsymbol{k}$ 表示，以区别于它的本征值 $\boldsymbol{p}$；而 $\boldsymbol{\nu}=\boldsymbol{k}/|\boldsymbol{k}|$，以区别于 $\boldsymbol{n}=\boldsymbol{p}/|\boldsymbol{p}|$②．在相对论极限时，

$$\psi_{n\lambda}(\boldsymbol{\nu})=w^{(\lambda)}(\boldsymbol{\nu})\delta^{(2)}(\boldsymbol{\nu}-\boldsymbol{n})=w^{(\lambda)}(\boldsymbol{n})\delta^{(2)}(\boldsymbol{\nu}-\boldsymbol{n}). \tag{16.3}$$

再详细一点，这个表达式应该写成

$$\psi_{n\lambda}(\boldsymbol{\nu},\sigma)=w_{\sigma}^{(\lambda)}(\boldsymbol{\nu})\delta^{(2)}(\boldsymbol{\nu}-\boldsymbol{n}),$$

明显地标明分立的独立变量 $\sigma$．

螺旋性算符 $\hat{\mathbf{s}}\cdot\boldsymbol{n}$ 与算符 $\hat{j}_z$ 和 $\hat{j}^2$ 对易．实际上，角动量算符与坐标系的无限小转动相联系．两个矢量的标量积对任何转动都不变．所以，存在着一些定态，在这些定态中，粒子同时具有一定

① 这些论证（像 $\lambda$ 的可能取值）是对质量不为零的粒子而言的．对零质量粒子来说不存在静止参考系，螺旋性只可能有两个值 $\lambda=\pm s$，原因如§8中所说：这种粒子的状态按照它们对轴对称群的行为分类，这种群只容许能级的二重简并（从波动方程的性质来看，这意味着当过渡到 $m\to 0$ 的极限时，自旋为 $s$ 的粒子的方程组分解为一些独立的方程，分别对应着自旋为 $s, s-1, \cdots$ 的无质量粒子）．例如，光子有 $\lambda=\pm 1$，对应的 $w^{(\lambda)}$ 是(8.2)的三维矢量 $\boldsymbol{e}^{(\pm 1)}$．

② $\delta$ 函数 $\delta^{(2)}$ 的定义是 $\int\delta^{(2)}(\boldsymbol{\nu}-\boldsymbol{n})do_{\nu}=1$．在(16.2)［以及下面(16.4)的类似情形］中略去了保证固定能量值的 $\delta$ 函数．

的角动量值 $j$，它的分量值 $j_z=m$ 和螺旋性 $\lambda$ 值. 这样的状态叫**球螺旋性态**.

我们来决定这些状态在动量表象中的波函数. 为此，只要与第三卷 § 103 中对称陀螺波 函数的公式直接类比就行了. 那些公式是根据波函数在有限转动下的变换规则得出的（第三卷 § 58)，而这些规则本身所依据的仅仅是转动对称性. 因此，它们适用于动量表象中的函数，就像适用于坐标函数一样.

除了固定的空间坐标系 $xyz$（函数 $\psi_{jm\lambda}$ 就是对这个坐标系写出的）以外，还要引入“动”坐标系 $\xi\eta\zeta$，它的 $\zeta$ 轴在 $\nu$ 方向上. 毋须重复相应的讨论过程[比较第三卷（103.8）的公式推导] 就能写出

$$\psi_{jm\lambda}(\boldsymbol{k})=\psi^{(0)}_{j\lambda}D^{(j)}_{\lambda m}(\boldsymbol{\nu}),$$

式中 $\psi^{(0)}_{j\lambda}$ 是“动”坐标系中的波函数，描写角动量在 $\zeta$ 轴上有确定分量值的粒子状态: $j_\zeta=\lambda$; 在动量表象中，这个函数显然就等于振幅 $u^{(\lambda)}$. 归一化的（见下面）波函数为

$$\psi_{jm\lambda}(\boldsymbol{k})=\sqrt{\frac{2j+1}{4\pi}}D^{(j)}_{\lambda m}(\boldsymbol{\nu})u^{(\lambda)}(\boldsymbol{k}). \tag{16.4}$$

但是，这里有一个相位选择问题，它与下面的非单值性有关系. 坐标系 $\xi\eta\zeta$ 对 $xyz$ 的转动由三个欧拉角 $\alpha,\beta,\gamma$ 确定，而决定粒子波函数的方向 $\nu$ 只取决于两个球面角 $\alpha\equiv\varphi$ 和 $\beta\equiv\theta$. 这样就必须约定 $\gamma$ 角的选择方式. 我们将取 $\gamma=0$，即定义 $D^{(j)}_{\lambda m}(\boldsymbol{\nu})$ 为

$$D^{(j)}_{\lambda m}(\boldsymbol{\nu})=D^{(j)}_{\lambda m}(\varphi,\theta,0)=\mathrm{e}^{im\varphi}d^{(j)}_{\lambda m}(\theta). \tag{16.5}$$

由于第 三 卷式(58.21)，函数(16.5)满足正交归一条件

$$\int D^{(j_1)*}_{\lambda_1 m_1}(\boldsymbol{\nu})D^{(j_2)}_{\lambda_2 m_2}(\boldsymbol{\nu})\frac{\mathrm{d}o_\nu}{4\pi}=\frac{1}{2j+1}\delta_{j_1j_2}\delta_{m_1m_2} \tag{16.6}$$

($\mathrm{d}o_\nu=\sin\theta\mathrm{d}\theta\mathrm{d}\varphi$). 函数 $\psi_{jm\lambda}$ 对指标 $\lambda$ 的正交性由因子 $u^{(\lambda)}$ 保证. 由此可见，函数 $\psi_{jm\lambda}$ 必定对三个指标 $j$、$m$、$\lambda$ 都正交，且在式(16.4)

的系数条件下，按

$$\int |\psi_{jm\lambda}|^2 \mathrm{d}o_\nu = 1 \tag{16.7}$$

归一化．这里我们假定振幅 $u^{(\lambda)}$已归一化：$u^{(\lambda)}u^{(\lambda)*}=1$.

现在我们来研究坐标反演下螺旋性状态波函数的行为．极矢量 $\boldsymbol{\nu}$ 与轴矢量 $\boldsymbol{j}$ 的乘积是赝标量．不难看出，反演变换使螺旋性 $\lambda$ 的状态变成螺旋性 $-\lambda$ 的状态，因而只需确定这种变换中的相因子即可．

在反演变换下，$\boldsymbol{\nu}\longrightarrow-\boldsymbol{\nu}$．矢量 $\boldsymbol{\nu}$ 由两个角度 $\varphi,\theta$ 确定，变换 $\boldsymbol{\nu}\longrightarrow-\boldsymbol{\nu}$ 由代换 $\varphi\longrightarrow\varphi+\pi,\theta\longrightarrow\pi-\theta$ 实现．这样就确定了新的 $\zeta$ 轴．但 $\xi$ 轴和 $\eta$ 轴的位置还因依赖于第三个欧拉角 $\gamma$ 而未确定．从这个意义上讲，仅仅 $\theta$ 和 $\varphi$ 的变换不可能把坐标系的反射和 $\zeta$ 轴的转动区别开来．用三个欧拉角来表述，反演就是变换

$$\alpha\equiv\varphi\to\varphi+\pi,\beta\equiv\theta\to\pi-\theta,\gamma\to\pi-\gamma. \tag{16.8}$$

因此，如果 $D^{(j)}_{\lambda m}(\boldsymbol{\nu})$按式(16.5) 确定(即 $\gamma=0$)，而把变换 $\boldsymbol{\nu}\to-\boldsymbol{\nu}$ 看成是反演的结果，那么

$$D^{(j)}_{\lambda m}(-\boldsymbol{\nu})=D^{(j)}_{\lambda m}(\varphi+\pi,\pi-\theta,\pi). \tag{16.9}$$

利用第三卷的公式(58.9)、(58.16)和(58.18)，就可以求出

$$\begin{aligned}D^{(j)}_{\lambda m}(-\boldsymbol{\nu})&=e^{i\lambda\pi}d^{(j)}_{\lambda m}(\pi-\theta)\mathrm{e}^{\mathrm{i}m(\varphi+\pi)}\\&=(-1)^{j-\lambda}\mathrm{e}^{\mathrm{i}m\varphi}d^{(j)}_{-\lambda\, m}(\theta)\\&=(-1)^{j-\lambda}D^{(j)}_{-\lambda m}(\varphi,\theta,0),\end{aligned}$$

或者

$$D^{(j)}_{\lambda m}(-\boldsymbol{\nu})=(-1)^{j-\lambda}D^{(j)}_{-\lambda m}(\boldsymbol{\nu}), \tag{16.10}$$

式中的 $j-\lambda$ 为整数．

对旋量 $w^{(\lambda)}$也存在类似的公式．只要注意到旋量的分量 $w^{(\lambda)}_\sigma$ 与这个函数只差一个因子，即

$$w_{\sigma}^{(\lambda)}(\nu) \sim D_{\lambda\sigma}^{(s)}(\nu)^{*}, \tag{16.11}$$

就可以看出这一点．实际上，对自旋的本征函数应用第三卷的变换公式(58.7)，并假设自旋的 $\zeta$ 轴分量具有确定的 $\lambda$ 值[即在第三卷(58.7)的右边用 $\delta_{m'\lambda}$ 代替 $\psi_{jm'}$]，我们发现，$D_{\lambda\sigma}^{(s)}(\nu)$是自旋的 $z$ 分量和 $\zeta$ 分量具有确定值($\sigma$ 和 $\lambda$)的自旋波函数．$\sigma$ 为 $-s$，…，$+s$ 的这组函数[按照第三卷的对应公式(57.6)]组成 $2s$ 秩协变旋量．根据第三卷的公式(57.2)，逆变旋量的分量与分量 $w_{\sigma}^{(\lambda)}$对应，在变换时与同秩协变旋量分量的复共轭一样．

根据式(16.10)和(16.11)，我们有

$$w^{(\lambda)}(-\boldsymbol{\nu}) = (-1)^{s-\lambda} w^{(-\lambda)}(\boldsymbol{\nu}), \tag{16.12}$$

式中的 $s-\lambda$ 是整数．对 $w^{(\lambda)}$ 施行反演运算不仅是将 $\boldsymbol{\nu}$ 变成 $-\boldsymbol{\nu}$，而且要乘以公共相因子(粒子的“内禀宇称”)$\eta$：

$$\hat{P} w^{(\lambda)}(\boldsymbol{\nu}) = \eta w^{(\lambda)}(-\boldsymbol{\nu}) = \eta(-1)^{s-\lambda} w^{(-\lambda)}(\boldsymbol{\nu}). \tag{16.13}$$

对于相对论性振幅 $u^{(\lambda)}(\boldsymbol{k})$，这个变换可以写成

$$\hat{P} u^{(\lambda)}(\boldsymbol{k}) = \eta \beta u^{(\lambda)}(-\boldsymbol{k}) = \eta(-1)^{s-\lambda} u^{(-\lambda)}(\boldsymbol{k}), \tag{16.14}$$

式中 $\beta$ 是某个矩阵，对于 $|\boldsymbol{p}|\to 0$ 的极限下仍然存在的 $u^{(\lambda)}$ 分量，它是一个单位矩阵．重要的是，这个矩阵与状态的量子数无关．从这个意义上讲，式(16.13)和(16.14)之间的差别是不重要的①．

将式(16.14)应用于(16.2)，我们得到状态 $|\boldsymbol{n}\lambda\rangle$ 的波函数的变换规则：

$$\hat{P}\psi_{\boldsymbol{n}\lambda}(\boldsymbol{\nu}) = \eta(-1)^{s-\lambda}\psi_{-\boldsymbol{n},-\lambda}(\boldsymbol{\nu}). \tag{16.15}$$

对球螺旋性态，应用式(16.10)和(16.12)，我们得到变换规则

$$\hat{P}\psi_{jm\lambda}(\boldsymbol{\nu}) = \eta(-1)^{j-s}\psi_{jm-\lambda}(\boldsymbol{\nu}). \tag{16.16}$$

按照式(16.16)，状态 $\psi_{jm0}$ 变换为其自身，即状态 $\psi_{jm0}$ 具有

---

① 例如，$s=1$ 时的振幅 $u^{(\lambda)}$是(16.22)的四维矢量；这时，对四维矢量指标而言，$\beta$ 完全是一个单位矩阵：$\beta_{\mu\nu}=\delta_{\mu\nu}$．当 $s=1/2$ 时，下一章将要看到，$u^{(\lambda)}$是一个双旋量；这时相因子 $\eta=i$，$\beta$ 是狄拉克矩阵 $\gamma^0$[参看(21.10)]．

确定的宇称. 如果 $\lambda\neq0$, 只有螺旋性相反的状态的叠加才具有确定的宇称:

$$\psi^{(\pm)}_{jm|\lambda|}=\frac{1}{\sqrt{2}}(\psi_{jm\lambda}\pm\psi_{jm-\lambda}), \qquad (16.17)$$

在反演变换下,它们按照下式变换为其自身:

$$\hat{P}\psi^{(\pm)}_{jm|\lambda|}(\nu)=\pm\eta(-1)^{j-s}\psi^{(\pm)}_{jm|\lambda|}(\nu). \qquad (16.18)$$

值得注意的是, 在这一节中我们对具有一定角动量的自由粒子的状态进行分类时, 只利用了守恒量而没有涉及轨道角动量的概念(在 § 6, § 7 两节对光子的状态分类时应用了这一概念).

作为一个例子, 我们来研究自旋为 1 的情形. 在静止参考系中,振幅 $u^{(\lambda)}$(四维矢量)变成三维矢量 $\boldsymbol{e}^{(\lambda)}$, 它在这里起振幅 $w^{(\lambda)}$ 的作用. 自旋为 1 的算符对矢量函数 $\boldsymbol{e}$ 的作用由公式

$$(\hat{s}_i\boldsymbol{e})_k=-\mathrm{i}e_{ikl}e_l \qquad (16.19)$$

给出(第三卷 § 57, 习题 2). 这样,方程(16.1)变成

$$\mathrm{i}[\boldsymbol{n}\times\boldsymbol{e}^{(\lambda)}]=\lambda\boldsymbol{e}^{(\lambda)}. \qquad (16.20)$$

在 $\zeta$ 轴沿 $\boldsymbol{n}$ 方向的坐标系 $\xi\eta\zeta$ 中, 它的解就是球单位矢量(7.14)①:

$$\boldsymbol{e}^{(0)}=i(0,0,1),\ \boldsymbol{e}^{(\pm1)}=\mp\frac{i}{\sqrt{2}}(1,\pm i,0). \qquad (16.21)$$

在粒子动量为 $\boldsymbol{p}$ 的参考系中,螺旋性状态的振幅是四维矢量

$$u^{(0)\mu}=\left(\frac{|\boldsymbol{p}|}{m},\frac{\varepsilon}{m}\boldsymbol{e}^{(0)}\right),\ u^{(\pm1)\mu}=(0,\boldsymbol{e}^{(\pm1)}). \qquad (16.22)$$

如果 $\boldsymbol{e}$ 是极矢量,则 $\eta=-1$,这时函数(16.17)(当 $s=1$ 时为三维矢量)具有下列宇称:

$$\psi^{(+)}_{jm|\lambda|}: P=(-1)^j,$$

① 相因子的选择按下述条件确定: 用本征函数(16.21)计算的自旋算符的矩阵元必须与第三卷 § 27、§ 107 中的一般定义相符.

$$\psi^{(-)}_{jm|\lambda|}: P=(-1)^{j+1},$$

$$\psi_{jm0}: P=(-1)^{j}.$$

与球谐矢量的定义(7.4)比较,我们看到,这些函数分别与 $\mathbf{Y}^{(e)}_{jm}$, $\mathbf{Y}^{(m)}_{jm}$, $\mathbf{Y}^{(l)}_{jm}$ 相同(仅差一个相因子). 确定相因子(譬如说,用比较 $\theta=0$ 时函数值的方法)后,我们得到下列等式:

$$\mathbf{Y}^{(e)}_{jm}=i^{j-1}\sqrt{\frac{2j+1}{8\pi}}(\boldsymbol{e}^{(1)}D^{(j)}_{1m}+\boldsymbol{e}^{(-1)}D^{(j)}_{-1m}),$$

$$\mathbf{Y}^{(m)}_{jm}=i^{j-1}\sqrt{\frac{2j+1}{8\pi}}(\boldsymbol{e}^{(1)\prime}D^{(j)}_{1m}+\boldsymbol{e}^{(-1)\prime}D^{(j)}_{-1m}), \qquad (16.23)$$

$$\mathbf{Y}^{(l)}_{jm}=i^{j-1}\sqrt{\frac{2j+1}{4\pi}}\boldsymbol{e}^{(0)}D^{(j)}_{0m}$$

式中的 $j$ 是一个整数! $\boldsymbol{e}^{(\lambda)\prime}=\boldsymbol{n}\times\boldsymbol{e}^{(\lambda)}$ 是沿轴 $\xi'$, $\eta'$, $\zeta$ 的球单位矢量; $\xi'$, $\eta'$, $\zeta$ 轴由 $\xi$, $\eta$, $\zeta$ 绕 $\zeta$ 轴转动 90° 得到.

公式(16.23)中的最后一个等价于第三卷中 $d^{(j)}_{0m}(0)$ 的表达式(58.23). 根据(16.23)中的第一个(或第二个)公式,可以得出函数 $d^{(j)}_{\pm1m}$ 的简单表达式. 我们有

$$i^{j-1}\sqrt{\frac{2j+1}{8\pi}}D^{(j)}_{\pm1m}=\mathbf{Y}^{(e)}_{jm}\cdot\boldsymbol{e}^{(\pm1)*}=\frac{1}{\sqrt{j(j+1)}}\boldsymbol{e}^{(\pm1)*}\cdot\nabla Y_{jm}.$$

等式右端的标量积可以在坐标系 $\xi\eta\zeta$ 中明确地写出来,且有

$$\left(\frac{\partial}{\partial\xi},\frac{\partial}{\partial\eta}\right)\longrightarrow\left(\frac{\partial}{\partial\theta},\frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\varphi}\right).$$

由函数 $Y_{jm}$ 的定义(7.2)和定义(16.5),我们得到结果

$$d^{(j)}_{\pm1m}(\theta)=(-1)^{m+1}\sqrt{\frac{(j-m)!}{(j+m)!\,j(j+1)}}$$

$$\times\left(\pm\frac{\partial}{\partial\theta}+\frac{m}{\sin\theta}\right)P^{m}_{j}(\cos\theta), \quad m\geqslant0. \qquad (16.24)$$

# 第三章 费 米 子

## § 17. 四维旋量

在非相对论性理论中，具有任意自旋 $s$ 的粒子用具有 $2s+1$ 个分量的量——$2s$ 秩对称旋量描述. 从数学观点来看，这些旋量就是空间转动群不可约表示的实现.

在相对论性理论中，这个群只不过是更广泛的四维转动群——洛伦兹群的一个子群. 因此，必须建立四维旋量的理论. 四维旋量是洛伦兹群不可约表示的实现，我们将在 § 17—§19 阐述. 在 §17, § 18 中只研究不包含空间反演的正洛伦兹群，在 § 19 中讨论空间反演.

四维旋量理论的建立类似于三维旋量理论 (B. L. vau der Waerden, 1929; G. E. Uhlenbeck, O. Laporte, 1931).

旋量 $\xi^\alpha$ 有两个分量 ($\alpha=1,2$). 作为 1/2 自旋粒子波函数的分量，$\xi^1$ 和 $\xi^2$ 分别对应于自旋 $z$ 分量的本征值 $+1/2$ 和 $-1/2$. 在(正)洛伦兹群的任何变换下，$\xi^1,\xi^2$ 两个量变换为它们自身的线性组合:

$$\left.\begin{aligned} \xi^{1'} &= \alpha\xi^1+\beta\xi^2, \\ \xi^{2'} &= \gamma\xi^1+\delta\xi^2. \end{aligned}\right\} \tag{17.1}$$

系数 $\alpha,\beta,\gamma,\delta$ 是四维坐标系转动角度的确定函数，遵守条件

$$\alpha\delta-\beta\gamma=1. \tag{17.2}$$

即二元变换(17.1)的行列式等于 1，这和洛伦兹群的坐标变换行列式一样.

由于条件(17.2)，二次型 $\xi^1\Xi^2-\xi^2\Xi^1$（$\xi^\alpha$ 和 $\Xi^\alpha$ 为两个旋量）对变换(17.1)不变（它对应着由两个 1/2 自旋粒子“组成”的零自旋粒子）．为了自然地写出这种不变的表达式，除了旋量的“逆变”分量 $\xi^\alpha$ 外，还要引入“协变”分量 $\xi_\alpha$．它们借助“度规旋量”$g_{\alpha\beta}$ 相互转换①：

$$\xi_\alpha=g_{\alpha\beta}\xi^\beta. \tag{17.3}$$

式中

$$g_{\alpha\beta}=\begin{pmatrix}0 & 1\\ -1 & 0\end{pmatrix}, \tag{17.4}$$

因而

$$\xi_1=\xi^2,\quad \xi_2=-\xi^1. \tag{17.5}$$

这样，不变量 $\xi^1\Xi^2-\xi^2\Xi^1$ 可以写成标量积的形式$\xi^\alpha\Xi_\alpha$，并且$\xi^\alpha\Xi_\alpha=-\xi_\alpha\Xi^\alpha$.

上述性质在形式上与三维旋量是一样的．但是，当讨论复共轭旋量时，二者就有了区别．

在非相对论性理论中，决定粒子在空间定域几率密度的量

$$\psi^1\psi^{1*}+\psi^2\psi^{2*} \tag{17.6}$$

必须是标量，因此，分量 $\psi^{\alpha*}$应该按照旋量的协变分量变换．换句话说，变换(17.1)应该是么正的($\alpha=\delta^*$，$\beta=-\gamma^*$)．而在相对论性理论中，粒子密度不是标量，而是四维矢量的时间分量．因而上述要求不再有效，除了式(17.2)，毋须对变换系数附加其它补充条件．四个复数量 $\alpha,\beta,\gamma,\delta$ 只在条件(17.2)下等价于8－2＝6个实参数——与决定四维坐标系转动的角度数目一致（在六个坐标面上转动）．

由此可见，复共轭二元变换实质上是互不相同的，因而在相对论性理论中有两类旋量．为了区分这两类旋量，我们采用专门的符

① 旋量指标用头几个希腊字母表示：$\alpha,\beta,\gamma,\cdots$

号：按式(17.1)的复共轭公式变换的旋量，在其指标上方加点(带点指标)．因此，根据定义，

$$\eta^{\dot{\alpha}} \sim \xi^{\alpha *}, \tag{17.7}$$

式中的符号～表示“被变换为”．换句话说，“带点”旋量的变换公式为：

$$\eta^{\dot{1}\prime}=\alpha^{*}\eta^{\dot{1}}+\beta^{*}\eta^{\dot{2}}, \eta^{\dot{2}\prime}=\gamma^{*}\eta^{\dot{1}}+\delta^{*}\eta^{\dot{2}}. \tag{17.8}$$

降低和升高带点指标的运算和不带点指标一样：

$$\eta_{\dot{1}}=\eta^{\dot{2}}, \qquad \eta_{\dot{2}}=-\eta^{\dot{1}}. \tag{17.9}$$

四维旋量在空间转动时的行为与三维旋量相同．对于三维旋量，我们知道，$\psi_{\alpha}^{*} \sim \psi^{\alpha}$．因而，根据定义(17.7)，四维旋量 $\eta_{\dot{\alpha}}$ 在转动时的行为和三维逆变旋量 $\psi^{\alpha}$ 一样．所以，协变分量 $\eta_{\dot{1}}$ 和 $\eta_{\dot{2}}$ 对应着自旋分量的本征值 1/2 和 −1/2.

高秩旋量定义为按照一秩旋量分量之积变换而得的若干量的集合．这些高秩旋量的指标可以是有的带点，有的不带点．例如，有下面三类二秩旋量：

$$\xi^{\alpha\beta} \sim \xi^{\alpha} \Xi^{\beta}, \quad \zeta^{\alpha\dot{\beta}} \sim \xi^{\alpha} \eta^{\dot{\beta}}, \ \eta^{\dot{\alpha}\dot{\beta}} \sim \eta^{\dot{\alpha}} H^{\dot{\beta}}.$$

仅仅给出一个旋量的总秩数还不能单值地确定高秩旋量概念．因此，在必要的地方，我们将用一对$(k, l)$数分别标明不带点指标和带点指标的数目从而指出属于何秩.

由于变换(17.1)和(17.8)在代数上是无关的，所以没有必要指明带点指标和不带点指标的次序(例如，$\zeta^{\alpha\dot{\beta}}$和$\zeta^{\dot{\beta}\alpha}$就是两个相同的旋量).

为了具有协变性，任何旋量方程的两边都应该包含相同数目的不带点指标和带点指标，否则，由一个参考系过渡到另一个参考系的时候，等式将明显地遭到破坏．这时必须记住，取复共轭指的

是交换不带点指标和带点指标. 因此,两个旋量之间的关系式 $\eta^{\dot{\alpha}\dot{\beta}}=(\xi^{\alpha\beta})^*$具有协变性.

旋量或旋量乘积只能对同类指标(带点指标或不带点指标)成对进行缩并. 一对不同类指标的求和不是协变的运算. 由于相对于旋量的一对对称指标进行缩并结果为零,因此,若旋量

$$\zeta^{\alpha_1\alpha_2\cdots\alpha_k\dot{\beta}_1\dot{\beta}_2\cdots\dot{\beta}_l} \tag{17.10}$$

对 $k$ 个不带点指标和 $l$ 个带点指标都对称, 就不能组成较低秩旋量. 这就是说,若由量(17.10)组成的线性组合在群的每一变换下又都变换为它们自身的线性组合,那么,这些线性组合的数目不会小于量(17.10)的数目. 换句话说,对称四维旋量就是正洛伦兹群不可约表示的实现. 每一个不可约表示都由一对数 $(k,l)$ 给定.

由于每一个旋量指标取两个值,所以在量(17.10)中有$k+1$个完全不同的数组 $\alpha_1\alpha_2\cdots\alpha_k$(含有 $0,1,2,\cdots,k$ 个 1 和 $k,\ k-1,\cdots,0$ 个 2)和$l+1$个数组 $\dot{\beta}_1\dot{\beta}_2\cdots\dot{\beta}_l$. 因此, $(k,l)$ 秩对称旋量总共有$(k+1)(l+1)$个独立分量, 这也就是相应的不可约表示的维数.

## § 18. 旋量与四维矢量的联系

具有一个带点指标和一个不带点指标的旋量 $\zeta^{\alpha\dot{\beta}}$ 有 $2\cdot2=4$ 个独立分量,与四维矢量的分量数相同. 显然,二者都是正洛伦兹群同一不可约表示的实现. 它们的分量之间应该有一定的关系.

为了建立这种关系, 考虑到三维旋量和四维旋量对纯空间转动的行为应该相同,让我们首先看看三维情形中的类似关系.

我们把三维旋量 $\psi^{\alpha\beta}$ 的对应公式(参看第三卷 § 57)写成如下形式:

$$a_x=\frac{1}{2}\ (\psi^{22}-\psi^{11})=\frac{1}{2}(\psi_1^2+\psi_2^1).$$

$$a_y=-\frac{i}{2}\ (\psi^{22}+\psi^{11})=\frac{i}{2}(\psi_2^1-\psi_1^2).$$

$$a_z=\frac{1}{2}(\psi^{12}+\psi^{21})=\ \frac{1}{2}(\psi_1^1-\psi_2^2).$$

这里 $a_x, a_y, a_z$ 是某个三维矢量 $a$ 的分量. 过渡到四维情形时，必须用$\zeta^{\alpha\dot{\beta}}$代替 $\psi^{\alpha}_{\beta}$，而把 $a_x, a_y, a_z$ 理解成四维矢量的逆变分量 $a^1$, $a^2, a^3$. 至于矢量的第四个分量 $a^0$，从 § 17 可以看出，量(17. 6)是按 $a^0$ 变换的，所以 $a^0\sim\zeta^{1\dot{1}}+\zeta^{2\dot{2}}$，比例系数的决定应该使标量 $\zeta_{\alpha\dot{\beta}}\zeta^{\alpha\dot{\beta}}$ 与标量 $2a_\mu a^\mu\equiv 2a^2$ 相等.

这样，我们得到下列对应公式:

$$a^1=\frac{1}{2}\ (\zeta^{1\dot{2}}+\zeta^{2\dot{1}}),\quad a^2=\frac{i}{2}\ (\zeta^{1\dot{2}}-\zeta^{2\dot{1}}).$$
$$a^3=\frac{1}{2}\ (\zeta^{1\dot{1}}-\zeta^{2\dot{2}}).\qquad a^0=\frac{1}{2}\ (\zeta^{1\dot{1}}+\zeta^{2\dot{2}}).\tag{18. 1}$$

其逆公式为

$$\zeta^{1\dot{1}}=\zeta_{2\dot{2}}=a^3+a^0.\quad \zeta^{2\dot{2}}=\zeta_{1\dot{1}}=a^0-a^3.$$
$$\zeta^{1\dot{2}}=-\zeta_{2\dot{1}}=a^1-ia^2,\ \ \zeta^{2\dot{1}}=-\zeta_{1\dot{2}}=a^1+ia^2.\tag{18. 2}$$

这时

$$\zeta_{\alpha\dot{\beta}}\zeta^{\alpha\dot{\beta}}=2a^2.\tag{18. 3}$$

我们还看到

$$\zeta_{\alpha\dot{\beta}}\zeta^{\gamma\dot{\beta}}=\delta^{\gamma}_{\alpha}a^2.\tag{18. 4}$$

这是由于二秩旋量$\zeta_{\alpha\dot{\beta}}\zeta^{\dot{\beta}}_{\gamma}$对指标 $\alpha$、$\gamma$ 反对称，因而与度规旋量成正比.

旋量 $\zeta^{\alpha\dot{\beta}}$ 和四维矢量的对应是下述一般规则的特殊情形：任何$(k, k)$秩对称旋量等价于 $k$ 秩对称不可约(即按任何一对指标缩

并时都得零)的四维张量.

旋量和四维矢量间的关系可以通过二阶泡利矩阵①

$$\sigma_x=\begin{pmatrix}0 & 1\\ 1 & 0\end{pmatrix},\quad \sigma_y=\begin{pmatrix}0 & -\mathrm{i}\\ \mathrm{i} & 0\end{pmatrix},\quad \sigma_z=\begin{pmatrix}1 & 0\\ 0 & -1\end{pmatrix} \tag{18.5}$$

表达得更为紧凑. 如果用符号 $\zeta$ 表示具有上指标（且第一个指标不带点）的量 $\zeta^{\alpha\dot{\beta}}$ 的矩阵，公式(18.2)可以写成

$$\zeta=\boldsymbol{a}\cdot\boldsymbol{\sigma}+a^0 \tag{18.6}$$

（第二项当然指的是 $a^0$ 与单位矩阵的乘积）. 它的逆公式是

$$\boldsymbol{a}=\frac{1}{2}\mathrm{Sp}(\zeta\boldsymbol{\sigma}),\qquad a^0=\frac{1}{2}\mathrm{Sp}\zeta. \tag{18.7}$$

利用公式(18.6)和(18.7)可以确定四维矢量和旋量的变换规则之间的关系，从而把旋量的变换规则用四维坐标系的转动参数表示出来.

旋量 $\xi^\alpha$ 的变换可以写成如下形式:

$$\xi^{\alpha\prime}=(B\xi)^\alpha,\qquad B=\begin{pmatrix}\alpha & \beta\\ \gamma & \delta\end{pmatrix}. \tag{18.8}$$

式中 $B$ 是由二元变换系数组成的二阶矩阵. 这时，带点旋量的变换为

$$\eta^{\dot{\beta}\prime}=(B^*\eta)^{\dot{\beta}}=(\eta B^+)^{\dot{\beta}}. \tag{18.9}$$

二秩旋量 $\zeta^{\alpha\dot{\beta}}\sim\xi^\alpha\eta^{\dot{\beta}}$ 变换的符号形式为 $\zeta'=B\zeta B^+$②. 对于无限小变换 $B=1+\lambda$，$\lambda$ 为一小矩阵，精确到一级小量时，

$$\zeta'=\zeta+(\lambda\zeta+\zeta\lambda^+) \tag{18.10}$$

我们首先研究参考系以无限小速度 $\delta\boldsymbol{V}$ 运动时的洛伦兹变换

---

① 为了简化符号，作用在旋量变量上的算符（矩阵）用不带帽字母表示.

② 对于协变分量:

$$\xi_\alpha'=(\tilde{B}^{-1}\xi)_\alpha=(\xi B^{-1})_\alpha,\ \eta_{\dot{\alpha}}'=(\eta B^{*-1})_{\dot{\alpha}} \tag{18.8a}$$

（这样，可使两个旋量之积 $\xi_\alpha\Xi^\alpha$ 保持不变）.

(不改变空间坐标轴的方向)．这时，四维矢量 $a^\mu=(a^0,\boldsymbol{a})$按照

$$\boldsymbol{a}'=\boldsymbol{a}-a^0\delta\boldsymbol{V},\quad a^{0\prime}=a^0-\boldsymbol{a}\cdot\delta\boldsymbol{V} \tag{18.11}$$

变换．现在我们利用公式(18.7)．$a^0$ 的变换一方面可以写成

$$a^{0\prime}=a^0-\boldsymbol{a}\cdot\delta\boldsymbol{V}=a^0-\frac{1}{2}\mathrm{Sp}(\zeta\boldsymbol{\sigma}\cdot\delta\boldsymbol{V}),$$

另一方面，又可以写成

$$a^{0\prime}=\frac{1}{2}\mathrm{Sp}\zeta'=a^0+\frac{1}{2}\mathrm{Sp}(\lambda\zeta+\zeta\lambda^+)=a^0+\frac{1}{2}\mathrm{Sp}\zeta(\lambda+\lambda^+).$$

这两个表达式对任意 $\zeta$ 值恒等．由此我们得到等式

$$\lambda+\lambda^+=-\boldsymbol{\sigma}\cdot\delta\boldsymbol{V}.$$

用同样的方法研究 $\boldsymbol{a}$ 的变换，我们得到

$$\boldsymbol{\sigma}\lambda+\lambda^+\boldsymbol{\sigma}=-\delta\boldsymbol{V}.$$

作为$\lambda$ 的方程式，这些等式的解为

$$\lambda=\lambda^+=-\frac{1}{2}\boldsymbol{\sigma}\cdot\delta\boldsymbol{V}.$$

由此可见，旋量 $\xi^\alpha$的无限小洛伦兹变换由矩阵

$$B=1-\frac{1}{2}(\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{n})\delta V \tag{18.12}$$

实现，式中的 $\boldsymbol{n}$ 是速度 $\delta\boldsymbol{V}$ 方向上的单位矢量．由此不难求出对有限速度 $\boldsymbol{V}$ 的变换．我们还记得，洛伦兹变换(在几何上)意味着四维坐标系在平面 $t$、$\boldsymbol{n}$ 内转动 $\varphi$ 角，$\varphi$ 与速度 $V$ 的关系为 $\mathrm{th}\varphi=V$① 无限小变换对应着角 $\delta\varphi=\delta V$，而转动有限角 $\varphi$ 是把转动 $\delta\varphi$ 重复 $\varphi/\delta\varphi$ 次．将算符(18.12)自乘 $\varphi/\delta\varphi$ 次并取极限 $\delta\varphi\to0$，我们得到

$$B=\mathrm{e}^{-\frac{\varphi}{2}\boldsymbol{n}\cdot\boldsymbol{\sigma}}. \tag{18.13}$$

为了阐明这个算符作用的数学意义，请注意泡利矩阵的性质：$\boldsymbol{n}\cdot\boldsymbol{\sigma}$

---

① 在包含时间轴的平面内，度规是伪欧几里德的．

的所有偶次幂都等于 1，奇次幂都等于 $\boldsymbol{n}\cdot\boldsymbol{\sigma}$. 考虑到双曲线函数 ch 的展开式是宗量的偶次幂，而 sh 是奇次幂，最后得到

$$B=\mathrm{ch}\frac{\varphi}{2}-\boldsymbol{n}\cdot\boldsymbol{\sigma}\mathrm{sh}\frac{\varphi}{2},\quad \mathrm{th}\varphi=V. \tag{18.14}$$

我们看到，洛伦兹变换矩阵 $B$ 是厄密的：$B=B^+$.

现在我们来研究空间坐标系的一个无限小转动．这时，三维矢量 $\boldsymbol{a}$ 按下式变换：

$$\boldsymbol{a}'=\boldsymbol{a}-\delta\boldsymbol{\theta}\times\boldsymbol{a}. \tag{18.15}$$

式中 $\delta\boldsymbol{\theta}$ 为无限小转角矢量．相应的旋量变换可以用类似的方法求出来，但在这里没有必要那样做，这是因为在空间转动时四维旋量的行为与三维旋量的完全一样，而三维旋量的变换大家已熟知．自旋算符与无限小转动算符的一般关系为

$$B=1+\frac{\mathrm{i}}{2}\boldsymbol{\sigma}\cdot\delta\boldsymbol{\theta} \tag{18.16}$$

向转动有限角度 $\theta$ 的过渡，类似于从式(18.12)过渡到式(18.14)，即为

$$B=\exp\left(\frac{\mathrm{i}\theta}{2}\boldsymbol{n}\cdot\boldsymbol{\sigma}\right)=\cos\frac{\theta}{2}+\mathrm{i}\boldsymbol{n}\cdot\boldsymbol{\sigma}\sin\frac{\theta}{2}, \tag{18.17}$$

式中 $\boldsymbol{n}$ 为转动轴上的单位矢量．这个矩阵对空间转动应该是么正的($B^+=B^{-1}$)，也确实是么正的．

## § 19. 旋量的反演

在第三卷中阐述旋量的三维理论时，我们没有考虑空间反演下旋量的行为，因为在非相对论性理论中，这不会引出任何新的物理结果．现在讲这个问题，是为了更好地理解后面对四维旋量反演性质的分析．

反演运算不改变轴矢量的符号(自旋矢量就是轴矢量)，因而自旋分量 $s_z$ 的值也不改变．由此得出，旋量的每一个分量 $\psi^\alpha$ 在

反演时只能变为自身的倍数，即

$$\psi^{\alpha}\rightarrow P\psi^{\alpha}, \tag{19.1}$$

这里的 $P$ 为常数因子．反演两次，就回到原来的坐标系．但对一个旋量而言，回到初始位置可以有两种理解：坐标系转动 0° 和 360°．由于转动360° 时 $\psi^{\alpha}$ 改变符号，因此，对旋量来说，这两种定义是不等价的．所以，有两种可能的反演概念：一种是

$$P^2=1, \quad P=\pm 1, \tag{19.2}$$

而另一种是

$$P^2=-1, \quad P=\pm \mathrm{i}. \tag{19.3}$$

重要的是，反演概念对一切旋量应该有同样的定义，不容许不同的旋量以不同的方式[即按照式(19.2)、或(19.3)]进行变换，否则不能由任意一对旋量组成标量(或赝标量)：如果旋量 $\psi^{\alpha}$ 按式(19.2)变换而 $\varphi_{\alpha}$ 按式(19.3)变换，那么 $\psi^{\alpha}\varphi_{\alpha}$ 在反演时需乘以 $\pm\mathrm{i}$ 而不是保持不变(或只改变符号)．

还应该着重指出，由于坐标系转动 $2\pi$ 时旋量改变符号(而这样的转动总是与反演同时进行的)，因此无论怎样定义反演，给旋量以某种确定的宇称 $P$ 没有绝对的意义．但是，如果定义由两个旋量组成的标量 $\psi^{\alpha}\varphi_{\alpha}$ 的宇称为这两个旋量的“相对宇称”，则因为转动 $2\pi$ 时两个旋量同时改变符号，与此相联系的不确定性并不影响上述标量的宇称，因而，两个旋量的“相对宇称”具有绝对意义．

现在我们来研究四维旋量．

首先我们看到，由于反演只改变四个坐标 $(t,x,y,z)$ 中三个 $(x,y,z)$ 的符号，因而它与空间转动对易而与转动 $t$ 轴的变换不对易．如果 $\hat{L}$ 是对以速度 $V$ 运动的参考系的洛伦兹变换，那么 $\hat{P}\hat{L}=\hat{L}'\hat{P}$，$\hat{L}'$ 是对以速度 $-V$ 运动的参考系的变换．

由此得出，在反演变换下，四维旋量 $\xi^\alpha$ 的分量不能变换成它们自身的倍数. 如果旋量 $\xi^\alpha$ 的反演仍然是变换(19.1)(即变换矩阵与单位矩阵成正比)，那么它显然应该与任何洛伦兹变换对易，而事实并非如此(因为对 $\xi^\alpha$ 来说，运算$\hat{L}$和$\hat{L}'$显然是不相同的).

由此可见，反演使旋量 $\xi^\alpha$ 的分量的变换结果中含有别的量，这样的量只能是变换性质与 $\xi^\alpha$ 不同的某个别的旋量 $\eta^{\dot{\alpha}}$的分量. 由于反演不改变自旋的 $z$ 分量(如上面所述)，则分量 $\xi^1$ 和 $\xi^2$ 在反演时只能变成与同样的 $s_z=1/2$ 和 $s_z=-1/2$ 值对应的分量 $\eta_{\dot{1}}$ 和 $\eta_{\dot{2}}$. 如果把反演理解成重复两次结果不变的运算，反演的作用可以定义为

$$\xi^\alpha \to \eta_{\dot{\alpha}}, \quad \eta_{\dot{\alpha}} \to \xi^\alpha \tag{19.4}$$

[对于协变分量$\xi_\alpha$和逆变分量 $\eta^{\dot{\alpha}}$而言，这种变换的符号相反:

$$\xi_\alpha \to -\eta^{\dot{\alpha}}, \quad \eta^{\dot{\alpha}} \to -\xi_\alpha, \tag{19.4a}$$

这是因为降低和升高同一指标时要变符号，参看式(17.5)和(17.9)]①. 如果在 $P^2=-1$ 的意义上来理解反演，那么反演作用可定义为

$$\xi^\alpha \to i\eta_{\dot{\alpha}}, \quad \eta_{\dot{\alpha}} \to i\xi^\alpha \tag{19.5}$$

或者

$$\xi_\alpha \to -i\eta^{\dot{\alpha}}, \quad \eta^{\dot{\alpha}} \to -i\xi_\alpha. \tag{19.5a}$$

反演的两种定义之间存在一定的差别. 在第二种定义的反演下，复共轭旋量以同一方式变换. 如果 $\Xi_\alpha=\eta^*_{\dot{\alpha}}$，$H^{\dot{\alpha}}=\xi^{\alpha*}$，则根据式(19.5)将有$\Xi_\alpha \to -iH^{\dot{\alpha}}$，$H^{\dot{\alpha}} \to -i\Xi_\alpha$，即与 $\xi_\alpha$，$\eta^{\dot{\alpha}}$的变换相同.

---

① 当然，由于量 $\xi^\alpha$ 和 $\eta_{\dot{\alpha}}$ 是独立的，(19.4)的定义在某种意义上是任意的. 例如，假若引入新的旋量 $\eta_{\dot{\alpha}}'=e^{i\delta}\eta_{\dot{\alpha}}$ 代替 $\eta_{\dot{\alpha}}$，(19.4)就为一等价的定义

$$\xi^\alpha \longrightarrow e^{-i\delta}\eta_{\dot{\alpha}}', \quad \eta_{\dot{\alpha}}' \longrightarrow e^{i\delta}\xi^\alpha$$

所代替.

而在定义(19.4)的反演下，我们将得到变换 $\Xi_{\alpha}\to H^{\dot{\alpha}}$， $H^{\dot{\alpha}}\to\Xi_{\alpha}$，与旋量 $\xi_{\alpha}$，$\eta^{\dot{\alpha}}$的变换比较，其符号相反．我们将在§27中讨论这种差别的某些可能的物理结论.

为确定起见，下面我们均指定义(19.5)进行讨论.

我们知道，旋量 $\xi^{\alpha}$ 和 $\eta_{\dot{\alpha}}$对转动子群的变换是相同的．由它们的分量组合

$$\xi^{\alpha}\pm\eta_{\dot{\alpha}} \tag{19.6}$$

所得到的量在反演下按照式(19.1)变换，且 $P=\pm\mathrm{i}$．但是，这种组合的行为并非对洛伦兹群的所有变换都与旋量一样.

所以，为使反演包含在对称群中，要求同时考查一对旋量($\xi^{\alpha}$，$\eta_{\dot{\alpha}}$)，这样的一对旋量叫**双旋量**(秩数为1)．双旋量的四个分量形成广义洛伦兹群的一个不可约表示的实现.

两个双旋量($\xi^{\alpha}$，$\eta_{\dot{\alpha}}$)和($\Xi^{\alpha}$，$H_{\dot{\alpha}}$)的标量积可以用两种方法构成．量

$$\xi^{\alpha}\Xi_{\alpha}+\eta_{\dot{\alpha}}H^{\dot{\alpha}} \tag{19.7}$$

对反演是不变的，是真标量；而量

$$\xi^{\alpha}\Xi_{\alpha}-\eta_{\dot{\alpha}}H^{\dot{\alpha}} \tag{19.8}$$

对四维坐标系的转动也是不变的，但在反演时改变符号，所以它是赝标量.

二秩旋量 $\zeta^{\alpha\dot{\beta}}$ 也可以用两种方法定义．若由变换规则

$$\zeta^{\alpha\dot{\beta}}\sim\xi^{\alpha}H^{\dot{\beta}}+\Xi^{\alpha}\eta^{\dot{\beta}} \tag{19.9}$$

定义，我们将得到在反演时按照

$$\zeta^{\alpha\dot{\beta}}\to\zeta_{\dot{\alpha}\beta} \tag{19.10}$$

变换的量．与这样的旋量等价的四维矢量 $a^{\mu}$[根据公式(18.1)]按

照 $(a^0, \boldsymbol{a}) \to (a^0, -\boldsymbol{a})$ 变换，是真四维矢量（而三维矢量 $\boldsymbol{a}$ 是极矢量）.

但是，$\xi^{\alpha\dot{\beta}}$ 也可以按照下式定义：

$$\xi^{\alpha\dot{\beta}} \sim \xi^{\alpha} H^{\dot{\beta}} - \Xi^{\alpha} \eta^{\dot{\beta}}. \qquad (19.11)$$

这时①

$$\xi^{\alpha\dot{\beta}} \to -\zeta_{\dot{\alpha}\beta}. \qquad (19.12)$$

这种旋量所对应的四维矢量，其反演变换是 $(a^0, \boldsymbol{a}) \to (-a^0, \boldsymbol{a})$，因而是四维赝矢量（而三维矢量 $\boldsymbol{a}$ 是轴矢量）.

具有同类指标的二秩对称旋量按下面的变换规则定义：

$$\xi^{\alpha\beta} \sim \xi^{\alpha} \Xi^{\beta} + \xi^{\beta} \Xi^{\alpha}, \quad \eta_{\dot{\alpha}\dot{\beta}} \sim \eta_{\dot{\alpha}} H_{\dot{\beta}} + \eta_{\dot{\beta}} H_{\dot{\alpha}}. \qquad (19.13)$$

在反演时它们相互转换：

$$\xi^{\alpha\beta} \to -\eta_{\dot{\alpha}\dot{\beta}}. \qquad (19.14)$$

$(\xi^{\alpha\beta}, \eta_{\dot{\alpha}\dot{\beta}})$ 形成二秩双旋量，它的独立分量数为 3+3 =6; 四维二秩反对称张量 $a^{\mu\nu}$ 的独立分量数也是这么多. 所以两者之间应该具有一定的对应关系（两者都是广义洛伦兹群的等价不可约表示的实现）.

由于旋量 $\xi^{\alpha\beta}$ 和 $\eta_{\dot{\alpha}\dot{\beta}}$ 对正洛伦兹群的变换是相互独立的，我们可以由四维张量 $a^{\mu\nu}$ 的分量组成两组量，这两组量对四维坐标系的一切转动只能互相变换. 其划分方法如下：

引入三维极矢量 $\boldsymbol{p}$ 和三维轴矢量 $\boldsymbol{a}$，它们与四维张量 $a^{\mu\nu}$ 的分量之间的关系是：

$$a^{\mu\nu} = \begin{pmatrix} 0 & p_x & p_y & p_z \\ -p_x & 0 & -a_z & a_y \\ -p_y & a_z & 0 & -a_x \\ -p_z & -a_y & a_x & 0 \end{pmatrix} \equiv (\boldsymbol{p}, \boldsymbol{a}) \qquad (19.15)$$

① 需要强调的是，变换规则(19.10)和(19.12)右边的符号不同，由于两式的两边是同一旋量的分量，因而绝不是等价的（参看本节的上一个注释）.

[$(\boldsymbol{p},\boldsymbol{a})$是一种简明记法，用来说明这种张量的分量]．这时，$a_{\mu\nu}=(-\boldsymbol{p},\boldsymbol{a})$．在两个量

$$\boldsymbol{a}^2-\boldsymbol{p}^2=\frac{1}{2}a_{\mu\nu}a^{\mu\nu},\quad \boldsymbol{a}\cdot\boldsymbol{p}=\frac{1}{8}e_{\mu\nu\rho\sigma}a^{\mu\nu}a^{\rho\sigma}$$

中，第一个是标量，第二个是赝标量；对正洛伦兹群二者都不变．此外，三维矢量 $\boldsymbol{f}^{\pm}=\boldsymbol{p}\pm \mathrm{i}\boldsymbol{a}$ 的平方也不变．这就是说，对于矢量 $\boldsymbol{f}^{\pm}$，四维空间的任一转动等价于三维空间中的一个复角“转动”(四维空间中的六个转动角相当于三维系统的三个复“转动角”)．空间反演运算改变 $\boldsymbol{p}$ 的符号，但不改变 $\boldsymbol{a}$ 的符号，因而它使矢量 $\boldsymbol{f}^{+}$ 和 $\boldsymbol{f}^{-}$ 互相转换．这些矢量的分量就是所求的两组量，它们由张量 $a^{\mu\nu}$ 的分量构成．

这样，四维张量 $a^{\mu\nu}$ 和旋量 $\xi^{\alpha\beta}$、$\eta_{\dot{\alpha}\dot{\beta}}$ 的分量之间的对应关系就很明显．由于将空间转动作为子群包含在洛伦兹群中，此旋量的分量和三维矢量的分量间的关系应该与三维旋量的情形一样：

$$\begin{aligned} f_x^{+}&=\frac{1}{2}(\xi^{22}-\xi^{11}),\ f_y^{+}=\frac{\mathrm{i}}{2}(\xi^{22}+\xi^{11}),\ f_z^{+}=\xi^{12};\\ f_x^{-}&=\frac{1}{2}(\eta_{\dot{2}\dot{2}}-\eta_{\dot{1}\dot{1}}),\ f_y^{-}=\frac{\mathrm{i}}{2}(\eta_{\dot{2}\dot{2}}+\eta_{\dot{1}\dot{1}}),\ f_z^{-}=\eta_{\dot{1}\dot{2}}. \end{aligned}\tag{19.16}$$

## 习　题

试推导偶秩旋量和四维张量之间的一般对应关系．

**解**　具有偶数 $k+l$ 秩的所有旋量是广义洛伦兹群的单值不可约表示的变换对象，因而等价于按同一表示变换的四维张量[①]．

$(k,k)$秩旋量在反演时按下式变换：

$$\xi^{\alpha\beta\cdots\dot{\gamma}\dot{\delta}\cdots}\longrightarrow\pm\xi_{\dot{\alpha}\dot{\beta}\cdots\gamma\delta\cdots}\tag{1}$$

这样的一个旋量等价于一个 $k$ 秩对称不可约四维张量，这个四维张量是真张量还是赝张量，取决于(1)式中的符号．

① 奇数秩旋量是群的双值表示：空间转动 360° 旋量改变符号，因而群的每一个元素对应着符号相反的两个矩阵．

组成双旋量的$(k, l)$和$(l, k)$秩旋量在反演时按照下式变换：

$$\zeta^{\overbrace{\alpha\beta\cdots}^{k}\overbrace{\dot{\gamma}\dot{\delta}\cdots}^{l}} \longrightarrow (-1)^{\frac{k-l}{2}} \chi_{\underbrace{\dot{\alpha}\dot{\beta}\cdots}_{k}\underbrace{\gamma\delta\cdots}_{l}}. \tag{2}$$

当 $l=k+2$ 时，这个双旋量等价于 $k+2$ 秩不可约四维张量 $a_{[\mu\nu]\rho\sigma\cdots}$，这个张量对指标$[\mu\nu]$反对称而对其余指标对称. 不可约性意味着该张量对任意一对指标的缩并为零，将任意三个指标配对时也为零（即$e^{\lambda\mu\nu\rho}a_{[\mu\nu]\rho\sigma}=0$）；后一条件又意味着张量对三个指标（$\mu\nu$ 和其余任何一个）循环求和时为零.

当 $l=k+4$ 时，该双旋量等价于 $k+4$ 秩不可约四维张量 $a_{[\lambda\mu][\gamma\rho]\sigma\tau\cdots}$，这个张量具有下列性质：对指标$[\lambda\mu]$和$[\nu\rho]$反对称而对其余指标对称，对交换$[\lambda\mu]$和$[\nu\rho]$对称，对任何一对指标的缩并为零，将任意三个指标配对时为零.

一般地，当 $l=k+2n$ 时，双旋量等价于 $k+2n$ 秩不可约四维张量，这个张量对 $n$ 对指标反对称，而对其余 $k$ 个指标对称. 在这种分类法中，不出现对较大数目（三个，四个，等等）的指标反对称的四维张量，原因很明显：一个三秩反对称张量等价于（对偶于）一个赝矢量，而四秩反对称张量可约简为一个标量（正比于单位赝张量 $e^{\lambda\mu\nu\rho}$）；在四维空间中，对更多指标的反对称性一般是不可能的.

## § 20. 旋量表象中的狄拉克方程

自旋为1/2的粒子在其静止参考系中用两个分量的波函数——三维旋量描述. 究其“四维根源”，它可以是不带点的四维旋量，也可以是带点的四维旋量. 在任一参考系中描述粒子，这两种四维旋量都要出现，我们用 $\xi^{\alpha}$ 和 $\eta_{\dot{\alpha}}$ 标记①.

对自由粒子而言，波动方程中可能出现的唯一算符（如在 §10 中已经指出的）是四维动量算符 $\hat{p}_{\mu}=i\partial_{\mu}$. 在旋量写法中，这个四维矢量相当于算符旋量$\hat{p}_{\alpha\dot{\beta}}$，且有

---

① 一秩三维旋量也可“起源”于较高奇数秩四维旋量，在静止参考系中，这个四维旋量对于一对或数对指标是反对称的. 但是，这种情况会导致更高阶的方程（比较 § 10 的第三个脚注）.

$$p^{1\dot{1}}=p_{2\dot{2}}=p_z+p_0,\quad p^{2\dot{2}}=p_{1\dot{1}}=p_0-p_z,$$
$$p^{1\dot{2}}=-p_{2\dot{1}}=p_x-ip_y,\quad p^{2\dot{1}}=-p_{1\dot{2}}=p_x+ip_y. \tag{20.1}$$

波动方程是用算符 $p_{\alpha\dot{\beta}}$ 表达的旋量分量之间的线性微分关系．相对论不变性要求给出下面的方程组:

$$p^{\alpha\dot{\beta}}\eta_{\dot{\beta}}=m\xi^{\alpha},\quad p_{\dot{\beta}\alpha}\xi^{\alpha}=m\eta_{\dot{\beta}}, \tag{20.2}$$

式中 $m$ 是有量纲的常数．在这两个方程中引入不同的常数 $m_1$ 和 $m_2$（或改变 $m$ 前面的符号）是没有意义的，这是因为适当地变换 $\xi^{\alpha}$ 或 $\eta_{\dot{\alpha}}$，方程仍然可以化为上面的形式.

从式(20.2) 的第二个方程求出 $\eta_{\dot{\beta}}$ 并代入第一个方程，可以消去一个旋量:

$$p^{\alpha\dot{\beta}}\eta_{\dot{\beta}}=\frac{1}{m}p^{\alpha\dot{\beta}}p_{\gamma\dot{\beta}}\xi^{\gamma}=m\xi^{\alpha}.$$

按照式(18.4)，$p^{\alpha\dot{\beta}}p_{\gamma\dot{\beta}}=p^2\delta^{\alpha}_{\gamma}$，因而我们得到:

$$(p^2-m^2)\xi^{\gamma}=0, \tag{20.3}$$

由此可见，$m$ 是粒子的质量.

应当看到，在波动方程中引入质量意味着要同时考虑两个旋量($\xi^{\alpha}$和 $\eta_{\dot{\alpha}}$)：仅用一个旋量不能组成包含一个有量纲的参数的相对论不变性方程式．如果把空间反演下波函数的变换定义为

$$P:\ \xi^{\alpha}\to i\eta_{\dot{\alpha}},\quad \eta_{\dot{\alpha}}\to i\xi^{\alpha}, \tag{20.4}$$

那么，波动方程就必然对空间反演不变．不难看出，进行这样的代换[并同时进行代换 $p^{\dot{\alpha}\beta}\to p_{\alpha\dot{\beta}}$，根据式(20.1)这是很明显的]，式(20.2)的两个方程就被互换．在反演变换下能够互换的两个旋量组成一个四分量的量——双旋量.

由方程组(20.2)表示的相对论性波动方程叫**狄拉克方程**（它是由**狄拉克**在 1928 年建立的)．为了进一步研究和应用这个方程，让我们看看它的各种表达形式.

利用公式(18.6)把方程(20.2)改写成

$$(\hat{p}_0+\hat{\boldsymbol{p}}\cdot\boldsymbol{\sigma})\eta=m\xi,\ (\hat{p}_0-\hat{\boldsymbol{p}}\cdot\boldsymbol{\sigma})\xi=m\eta. \tag{20.5}$$

符号 $\xi$ 和 $\eta$ 在这里代表两分量的量——旋量

$$\xi=\begin{pmatrix}\xi^1\\ \xi^2\end{pmatrix},\qquad \eta=\begin{pmatrix}\eta_{\dot{1}}\\ \eta_{\dot{2}}\end{pmatrix} \tag{20.6}$$

(第一个带上指标,而第二个带下指标). 今后, 矩阵 $\sigma$ 乘以任一两分量的量 $f$,都按一般的矩阵法则相乘:

$$(\sigma f)_\alpha=\sigma_{\alpha\beta}f_\beta. \tag{20.7}$$

$f$ 在这里写成竖列的形式 $\begin{pmatrix}f_1\\ f_2\end{pmatrix}$, $\sigma$ 中的每一行都要与 $f$ 的竖列相乘.

为了今后引用方便起见,这里再次写出泡利矩阵

$$\sigma_x=\begin{pmatrix}0 & 1\\ 1 & 0\end{pmatrix},\ \sigma_y=\begin{pmatrix}0 & -i\\ i & 0\end{pmatrix},\quad \sigma_z=\begin{pmatrix}1 & 0\\ 0 & -1\end{pmatrix} \tag{20.8}$$

它们的基本性质是:

$$\sigma_i\sigma_k+\sigma_k\sigma_i=2\delta_{ik},\qquad \sigma_i\sigma_k=ie_{ikl}\sigma_l+\delta_{ik} \tag{20.9}$$

(参看第三卷 § 55).

我们还要写出由旋量

$$\xi^*=(\xi^{1*},\xi^{2*}),\qquad \eta^*=(\xi^*_{\dot{1}},\eta^*_{\dot{2}}) \tag{20.10}$$

组成的复共轭波函数所满足的波动方程. 由于所有算符 $\hat{p}_\mu$ 都含有因子 i,所以 $\hat{p}^*_\mu=-\hat{p}_\mu$. 方程(20.5)两边取复共轭时还必须考虑到,由于矩阵 $\sigma$ 是厄密的($\sigma^*=\tilde{\sigma}$),

$$(\sigma f)^*_\alpha=\sigma^*_{\alpha\beta}f^*_\beta=f^*_\beta\sigma_{\beta\alpha}=(f^*\sigma)_\alpha,$$

结果得到如下形式的方程:

$$\eta^*(\hat{p}_0+\hat{\boldsymbol{p}}\cdot\boldsymbol{\sigma})=-m\xi^*,\ \xi^*(\hat{p}_0-\hat{\boldsymbol{p}}\cdot\boldsymbol{\sigma})=-m\eta^*. \tag{20.11}$$

在这种写法中, 算符 $\hat{p}^\mu$ 作用在它左面的函数上. 把 $\xi^*$ 和 $\eta^*$ 写

成横行是为了与这两个方程中的矩阵乘法一致：$f$ 的行与矩阵 $\sigma$ 的列相乘：

$$(f^*\sigma)_\alpha = f^*_\beta \sigma_{\beta\alpha}. \tag{20.12}$$

$\xi^*, \eta^*$ 的反演变换定义为变换(20.4)的复共轭：

$$P:\ \xi^{\alpha *} \to -i\eta^*_{\dot\alpha}, \quad \eta^*_{\dot\alpha} \to -i\xi^{\alpha *}. \tag{20.13}$$

## § 21. 狄拉克方程的对称形式

狄拉克方程的旋量形式是直接显示其相对论不变性的最自然形式. 但在具体应用时，通过另行选择波函数的四个独立分量而得到的波动方程的其它形式更为方便.

我们用符号 $\psi$(其分量为 $\psi_i, i=1,2,3,4$) 表示四分量的波函数，在旋量表示中，这就是双旋量

$$\psi = \begin{pmatrix} \xi \\ \eta \end{pmatrix}. \tag{21.1}$$

但是，同样可以选择旋量 $\xi$ 和 $\eta$ 的分量的任何线性独立组合作为 $\psi$ 的独立分量①. 这时，只有么正性条件能限制所容许的线性变换，而这样的变换不改变由 $\psi$ 和 $\psi^*$ 组成的双线性形式(§28).

在任意选择 $\psi$ 分量的一般情况下，狄拉克方程可以表示成如下形式：

$$p_\mu \gamma^\mu_{ik} \psi_k = m\psi_i.$$

这里 $\gamma^\mu (\mu=0,1,2,3)$是某种四阶矩阵 (**狄拉克矩阵**)；通常我们把这个方程写成符号形式而略去矩阵指标：

$$(\gamma p - m)\psi = 0. \tag{21.2}$$

式中

$$\gamma p \equiv \gamma^\mu p_\mu = p_0\gamma^0 - \boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{\gamma} = i\gamma^0\frac{\partial}{\partial t} + i\boldsymbol{\gamma}\cdot\nabla, \boldsymbol{\gamma} = (\gamma^1, \gamma^2, \gamma^3).$$

---

① 为简单起见，我们把四分量的量 $\psi$ 在它的非旋量表象中也称为双旋量.

例如，当 $\psi$ 的分量有如式(21.1)时，与方程的旋量形式对应的矩阵是①

$$\gamma^0=\begin{pmatrix}0 & 1\\ 1 & 0\end{pmatrix},\qquad \boldsymbol{\gamma}=\begin{pmatrix}0 & -\boldsymbol{\sigma}\\ \boldsymbol{\sigma} & 0\end{pmatrix} \tag{21.3}$$

只要把方程(20.5)写成如下形式

$$\begin{pmatrix}0 & p_0+\hat{\mathbf{p}}\cdot\boldsymbol{\sigma}\\ p_0-\hat{\mathbf{p}}\cdot\boldsymbol{\sigma} & 0\end{pmatrix}\begin{pmatrix}\xi\\ \eta\end{pmatrix}=m\begin{pmatrix}\xi\\ \eta\end{pmatrix}$$

并与式(21.2)比较，就不难看出这一点.

在一般情况下，矩阵 $\gamma$ 应该满足的唯一条件是保证等式 $p^2=m^2$ 成立. 为了求出这个条件，给方程(21.2)左乘以 $\gamma p$，我们有

$$(\gamma^\mu p_\mu)(\gamma^\nu p_\nu)\psi=m(p_\mu\gamma^\mu)\psi=m^2\psi.$$

因为 $p_\mu p_\nu$ 是一对称张量(所有的 $p_\mu$ 算符都对易)，这个等式可以改写成

$$\frac{1}{2}p_\mu p_\nu(\gamma^\mu\gamma^\nu+\gamma^\nu\gamma^\mu)\psi=m^2\psi,$$

因此，必定有

$$\gamma^\mu\gamma^\nu+\gamma^\nu\gamma^\mu=2g^{\mu\nu}. \tag{21.4}$$

这样，两个不同的 $\gamma^\mu$ 矩阵总是反对易，每个矩阵的平方为

$$(\gamma^1)^2=(\gamma^2)^2=(\gamma^3)^2=-1,\quad (\gamma^0)^2=1. \tag{21.5}$$

当 $\psi$ 分量进行任一么正变换时($\psi'=U\psi$,$U$ 为四阶么正矩阵)，矩阵 $\gamma$ 按下式变换

$$\gamma'=U\gamma U^{-1}=U\gamma U^+ \tag{21.6}$$

(因而方程$(\gamma p-m)\psi=0$ 变成$(\gamma' p-m)\psi'=0$). 这时，对易关系(21.4)当然保持不变.

(21.3)的矩阵 $\gamma^0$ 是厄密的，而矩阵 $\boldsymbol{\gamma}$ 是反厄密的. 当进行

---

① 今后，我们利用二阶矩阵简化四阶矩阵的写法：表式(21.3)中的每一个符号都是二阶矩阵.

任何么正变换(21.6)时，这些性质都保持不变，因而我们始终有[①]

$$\boldsymbol{\gamma}^{+}=-\boldsymbol{\gamma}, \quad \gamma^{0+}=\gamma^{0}. \tag{21.7}$$

我们还要给出复共轭函数 $\psi^*$ 的方程. 取方程(21.2)的复共轭，考虑到式(21.7)的性质，我们得到

$$(-\hat{p}_0\tilde{\gamma}^0-\hat{\boldsymbol{p}}\cdot\tilde{\boldsymbol{\gamma}}-m)\psi^*=0.$$

按照 $\tilde{\gamma}^{\mu}\psi^*=\psi^*\gamma^{\mu}$ 移置 $\psi^*$，然后给整个方程右乘以 $\gamma^0$，注意到 $\boldsymbol{\gamma}\gamma^0=-\gamma^0\boldsymbol{\gamma}$，并且引入新的双旋量

$$\bar{\psi}=\psi^*\gamma^0, \quad \psi^*=\bar{\psi}\gamma^0, \tag{21.8}$$

我们得到

$$\bar{\psi}(\gamma\hat{p}+m)=0. \tag{21.9}$$

正如式(20.11)，这里算符 $\hat{p}$ 也作用在它左边的函数上. 函数 $\bar{\psi}$ 叫做 $\psi$ 的**狄拉克共轭**(或相对论共轭)函数. 按照定义，因子 $\gamma^0$ 的作用是(在旋量表象中)互换旋量 $\xi^*$ 和 $\eta^*$. 这样，$\bar{\psi}=(\eta^*,\xi^*)$ 中的第一个是不带点旋量(和 $\psi$ 中一样)，而第二个是带点旋量. 正是由于这个原因，与 $\psi^*$ 相比，$\bar{\psi}$ 与 $\psi$ “搭配”更为自然. 例如，它们共同出现在各种双线性组合中(参看 § 28).

波函数的反演变换可以表示为

$$P: \quad \psi\to i\gamma^0\psi, \quad \bar{\psi}\to -i\bar{\psi}\gamma^0. \tag{21.10}$$

在 $\psi$ 的旋量表象中，矩阵 $\gamma^0$ 将分量 $\xi$ 和 $\eta$ 互换，这正好是反演时应该出现的情况. 在一般情况下，狄拉克方程对变换(21.10)的不变性是明显而直接的：在方程(21.2)中同时进行代换 $\hat{\boldsymbol{p}}\to-\hat{\boldsymbol{p}}$ 和 $\psi\to i\gamma^0\psi$，我们有

$$(\hat{p}_0\gamma^0+\hat{\boldsymbol{p}}\cdot\boldsymbol{\gamma}-m)\gamma^0\psi=0.$$

这个方程左乘以 $\gamma^0$ 并考虑到 $\gamma^0$ 和 $\boldsymbol{\gamma}$ 反对易，就回到原方程.

方程 $(\gamma\hat{p}-m)\psi=0$ 左乘以 $\bar{\psi}$，方程 $\bar{\psi}(\gamma\hat{p}+m)=0$ 右乘以 $\psi$，

---

① 这两个等式可以合并成

$$\gamma^{\lambda+}=\gamma^0\gamma^{\lambda}\gamma^0 \tag{21.7a}$$

再把它们相加，我们得到

$$\bar{\psi}\gamma^{\mu}(\hat{p}_{\mu}\psi)+(\hat{p}_{\mu}\bar{\psi})\gamma^{\mu}\psi=\hat{p}_{\mu}(\bar{\psi}\gamma^{\mu}\psi)=0,$$

式末的括号指出算符 $\hat{p}$ 所作用的函数．这个方程具有连续性方程 $\partial_{\mu}j^{\mu}=0$ 的形式，因而量

$$j^{\mu}=\bar{\psi}\gamma^{\mu}\psi=(\psi^{*}\psi,\ \psi^{*}\gamma^{0}\boldsymbol{\gamma}\psi) \tag{21.11}$$

是粒子的四维流密度矢量．我们看到，它的时间分量 $j^{0}=\psi^{*}\psi$ 是正定的。

狄拉克方程可以表示成对时间微商的形式：

$$i\frac{\partial\psi}{\partial t}=\hat{H}\psi, \tag{21.12}$$

式中的 $\hat{H}$ 为粒子的哈密顿量①．为了得到这个形式，只需给方程(21.2)左乘以 $\gamma^{0}$．哈密顿量的表达式为

$$\hat{H}=\boldsymbol{\alpha}\hat{\boldsymbol{p}}+\beta m, \tag{21.13}$$

式中引入了表示有关矩阵的惯用符号

$$\boldsymbol{\alpha}=\gamma^{0}\boldsymbol{\gamma},\quad \beta=\gamma^{0}. \tag{21.14}$$

我们看到，

$$\alpha_{i}\alpha_{k}+\alpha_{k}\alpha_{i}=2\delta_{ik},\quad \beta\boldsymbol{\alpha}+\boldsymbol{\alpha}\beta=0,\quad \beta^{2}=1, \tag{21.15}$$

即矩阵 $\boldsymbol{\alpha}$、$\beta$ 都是反对易的，而其平方是单位矩阵；它们都是厄密的．在旋量表象中，

$$\boldsymbol{\alpha}=\begin{pmatrix}\boldsymbol{\sigma} & 0\\ 0 & -\boldsymbol{\sigma}\end{pmatrix},\quad \beta=\begin{pmatrix}0 & 1\\ 1 & 0\end{pmatrix}. \tag{21.16}$$

在低速的极限情况下，和非相对论性理论中一样，粒子应该只用一个两分量的旋量描述．实际上，在方程(20.5)中取极限 $\boldsymbol{p}\longrightarrow 0$，$\varepsilon\longrightarrow 0$，我们得到 $\xi=\eta$，即组成双旋量的两个旋量完全相同．

---

① 零自旋粒子的波动方程不能写成这种形式：对标量 $\psi$ 来说，方程(10.5)是时间的二阶方程，而五分量的量 $(\psi,\psi_{\mu})$ 的一阶方程组(10.4)不包含对所有分量的时间微商．

但是，这显示出狄拉克方程的旋量形式的一个缺点：在上述极限情形下，$\psi$ 的四个分量都不为零，虽然实际上只有两个是独立的．波函数 $\psi$ 更方便的描述应该是在低速极限下它的两个分量为零．

为此，我们引入线性组合 $\varphi$ 和 $\chi$

$$\psi=\begin{pmatrix}\varphi\\ \chi\end{pmatrix},\qquad \varphi=\frac{1}{\sqrt{2}}(\xi+\eta),\quad \chi=\frac{1}{\sqrt{2}}(\xi-\eta) \tag{21.17}$$

代替 $\xi$ 和 $\eta$．这时，对静止的粒子，$\chi=0$．$\psi$ 的这种表象我们称之为**标准表象**．在反演时，$\varphi$ 和 $\chi$ 按下式变换：

$$P:\ \varphi\to \mathrm{i}\varphi,\quad \chi\to -\mathrm{i}\chi. \tag{21.18}$$

对方程组(20.5)进行加减，就得到 $\varphi$ 和 $\chi$ 的方程组：

$$\hat{p}_0\varphi-\hat{\boldsymbol{p}}\cdot\boldsymbol{\sigma}\chi=m\varphi,\quad -\hat{p}_0\chi+\hat{\boldsymbol{p}}\cdot\boldsymbol{\sigma}\varphi=m\chi. \tag{21.19}$$

由此可见，适应于标准表象的矩阵是

$$\gamma^0\equiv\beta=\begin{pmatrix}1 & 0\\ 0 & -1\end{pmatrix},\quad \boldsymbol{\gamma}=\begin{pmatrix}0 & \boldsymbol{\sigma}\\ -\boldsymbol{\sigma} & 0\end{pmatrix},\quad \boldsymbol{\alpha}=\begin{pmatrix}0 & \boldsymbol{\sigma}\\ \boldsymbol{\sigma} & 0\end{pmatrix} \tag{21.20}$$

由于式(21.17)中 $\xi$ 和 $\eta$ 的第一个和第二个分量分别相加，所以，和旋量表象中一样，在标准表象中，分量 $\psi_1$ 和 $\psi_3$ 也对应着自旋分量的本征值 $+1/2$，而 $\psi_2$ 和 $\psi_4$ 对应着 $-1/2$．因而，若引入矩阵

$$\boldsymbol{\Sigma}=\begin{pmatrix}\boldsymbol{\sigma} & 0\\ 0 & \boldsymbol{\sigma}\end{pmatrix}, \tag{21.21}$$

在两种表象中，矩阵 $\frac{1}{2}\boldsymbol{\Sigma}$ 都是一个三维自旋算符：当 $\frac{1}{2}\Sigma_z$ 作用在只包含分量 $\psi_1$、$\psi_3$ 或 $\psi_2$、$\psi_4$ 的双旋量上时，该双旋量就乘以 $+1/2$ 或 $-1/2$．在任一表象中，矩阵(21.21)可以写成

$$\boldsymbol{\Sigma}=-\boldsymbol{\alpha}\gamma^5=-\frac{i}{2}[\boldsymbol{\alpha}\cdot\boldsymbol{\alpha}] \tag{21.22}$$

[$\gamma^5$ 的定义参看下面式(22.14)]．

## 习　　题

1. 求波函数在无限小洛伦兹变换和无限小空间转动下的变换公式.

**解**　在$\psi$的旋量表象中,无限小洛伦兹变换给出

$$\xi'=\left(1-\frac{1}{2}\sigma\cdot\delta V\right)\xi,\qquad \eta'=\left(1+\frac{1}{2}\sigma\cdot\delta \boldsymbol{V}\right)\eta$$

参看式(18.8),(18.8a),(18.10)]. 这两个公式可以合并为

$$\psi'=\left(1-\frac{1}{2}\boldsymbol{\alpha}\cdot\delta\boldsymbol{V}\right)\psi. \tag{1}$$

类似地,无限小转动下的变换是

$$\psi'=\left(1+\frac{\mathrm{i}}{2}\boldsymbol{\Sigma}\cdot\delta\boldsymbol{\theta}\right)\psi. \tag{2}$$

公式的这种形式在$\psi$的任何表象中都是正确的,只要把$\boldsymbol{\alpha}$和$\boldsymbol{\Sigma}$看成同一表象中的矩阵就行了.

容易证明,矩阵$\boldsymbol{\alpha}$和$\boldsymbol{\Sigma}$是一个反对称"四维矩阵张量"的分量:

$$\rho^{\mu\nu}=\frac{1}{2}(\gamma^{\mu}\gamma^{\nu}-\gamma^{\nu}\gamma^{\mu})=(\boldsymbol{\alpha},\mathrm{i}\boldsymbol{\Sigma})$$

[分量按规则(19.15)排列]. 再引入无限小反对称张量$\delta\varepsilon^{\mu\nu}=(\delta\boldsymbol{V},\ \delta\boldsymbol{\theta})$,则有

$$\sigma^{\mu\nu}\delta\varepsilon_{\mu\nu}=2\mathrm{i}\boldsymbol{\Sigma}\cdot\delta\boldsymbol{\theta}-2\boldsymbol{\alpha}\cdot\delta\boldsymbol{V},$$

且公式(1),(2)可以统一写为

$$\psi'=\left(1+\frac{1}{4}\sigma^{\mu\nu}\delta\varepsilon_{\mu\nu}\right)\psi. \tag{3}$$

2. 在不含虚系数的表象中写出狄拉克方程(E. Majorana, 1937).

**解**　在标准表象中,方程

$$\left(\frac{\partial}{\partial t}+\alpha_x\frac{\partial}{\partial x}+\alpha_y\frac{\partial}{\partial y}+\alpha_z\frac{\partial}{\partial z}+\mathrm{i}m\beta\right)\psi=0$$

中只有矩阵$\alpha_y$和$\mathrm{i}\beta$是虚量. 一个可互换虚矩阵$\alpha_y$和实矩阵$\beta$的变换$\psi'=U\psi$,可以消除这些虚量. 为此,必须假设

$$U=\frac{1}{\sqrt{2}}(\alpha_y+\beta)=U^{-1}.$$

这时

$$\alpha_x'=U\alpha_xU=-\alpha_x,\ \ \alpha_y'=\beta,\ \ \alpha_z'=-\alpha_z,\ \ \beta'=\alpha_y,$$

狄拉克方程变为

$$\left(\frac{\partial}{\partial t}-\alpha_x\frac{\partial}{\partial x}+\beta\frac{\partial}{\partial y}-\alpha_z\frac{\partial}{\partial z}+\mathrm{i}m\alpha_y\right)\psi'=0,$$

其中所有的系数都是实的.

## § 22. 狄拉克矩阵代数

在运用狄拉克方程的计算中，$\gamma$ 矩阵会反复出现，而与它在特定表象中的具体形式无关. 含有这种矩阵的运算规则完全由对易关系

$$\gamma^\mu\gamma^\nu+\gamma^\nu\gamma^\mu=2g^{\mu\nu}\quad(\mu,\nu=0,1,2,3)\tag{22.1}$$

给定，对易关系表达了这种矩阵的普遍性质.

在本节中，我们要推导 $\gamma$ 矩阵代数的各种公式和规则. $\gamma$ 矩阵在各种运算中都会用到.

$\gamma$ 矩阵与其自身的"标量积"是 $g_{\mu\nu}\gamma^\mu\gamma^\nu=4$. 为使书写简单，类似于四维矢量的协变分量，我们引入符号 $\gamma_\mu=g_{\mu\nu}\gamma^\nu$. 这时

$$\gamma_\mu\gamma^\mu=4.\tag{22.2}$$

如果矩阵 $\gamma_\mu$ 和 $\gamma^\mu$ 被一个或几个 $\gamma$ 因子分隔开，那么可以利用法则(22.1)，通过因子的一次或几次互换位置而使 $\gamma_\mu$ 和 $\gamma^\mu$ 相邻，然后按照式(22.2)对 $\mu$ 求和. 用这样的方法可以得到下列公式:

$$\begin{gathered}\gamma_\mu\gamma^\nu\gamma^\mu=-2\gamma^\nu,\\ \gamma_\mu\gamma^\lambda\gamma^\nu\gamma^\mu=4g^{\lambda\nu},\\ \gamma_\mu\gamma^\lambda\gamma^\nu\gamma^\rho\gamma^\mu=-2\gamma^\rho\gamma^\nu\gamma^\lambda,\\ \gamma_\mu\gamma^\lambda\gamma^\nu\gamma^\rho\gamma^\sigma\gamma^\mu=2(\gamma^\sigma\gamma^\lambda\gamma^\nu\gamma^\rho+\gamma^\rho\gamma^\nu\gamma^\lambda\gamma^\sigma).\end{gathered}\tag{22.3}$$

因子 $\gamma^\mu$，…通常以"标量积"①的形式出现在与各种四维矢量的组合中:

$$\gamma a\equiv\gamma^\mu a_\mu.\tag{22.4}$$

① 在本书的这一版中，对这种乘积我们没有用任何专门的符号表示，在文献中常常用带帽字母或加重字母表示.

由此标量积，公式(22.1)可写成：

$$(a\gamma)(b\gamma)+(b\gamma)(a\gamma)=2(ab),$$
$$(a\gamma)(a\gamma)=a^2, \tag{22.5}$$

而公式(22.3)为

$$\begin{gathered}\gamma_\mu(a\gamma)\gamma^\mu=-2(a\gamma),\\ \gamma_\mu(a\gamma)(b\gamma)\gamma^\mu=4(ab),\\ \gamma_\mu(a\gamma)(b\gamma)(c\gamma)\gamma^\mu=-2(c\gamma)(b\gamma)(a\gamma),\\ \gamma_\mu(a\gamma)(b\gamma)(c\gamma)(d\gamma)\gamma^\mu=2[(d\gamma)(a\gamma)(b\gamma)(c\gamma)\\ +(c\gamma)(b\gamma)(a\gamma)(d\gamma)].\end{gathered} \tag{22.6}$$

一个常用的运算是求若干个 $\gamma$ 矩阵的乘积之迹. 我们来研究量

$$T^{\mu_1\mu_2\cdots\mu_n}\equiv\frac{1}{4}\mathrm{Sp}(\gamma^{\mu_1}\gamma^{\mu_2}\cdots\gamma^{\mu_n}). \tag{22.7}$$

根据矩阵乘积之迹的已知性质，这个张量对指标 $\mu_1\mu_2\cdots\mu_n$ 的循环换位对称.

因为矩阵 $\gamma$ 在任意参考系中具有同一形式，因而 $T$ 也不依赖于参考系的选择，且形成一个完全可用度规张量 $g_{\mu\nu}$($g_{\mu\nu}$ 不依赖参考系)表达的张量.

但是，由二秩张量 $g_{\mu\nu}$ 只能组成偶秩张量. 由此立即得出，任何奇数个 $\gamma$ 因子的乘积之迹等于零；特别是，每一个 $\gamma$ 的迹等于零①：

$$\mathrm{Sp}\gamma^\mu=0. \tag{22.8}$$

单位四阶矩阵[对易关系(22.1)右边的矩阵]之迹等于 4. 对式(22.1)两边取迹，我们求出

$$T^{\mu\nu}=g^{\mu\nu}. \tag{22.9}$$

---

① 矩阵的迹对变换 $\gamma=U\gamma U^{-1}$ 是不变的. 这样，显然可由矩阵的具体表达式(21.3)得出(22.8)的如果.

四个矩阵乘积之迹为

$$T^{\lambda\mu\nu\rho}=g^{\lambda\mu}g^{\nu\rho}-g^{\lambda\nu}g^{\mu\rho}+g^{\lambda\rho}g^{\mu\nu}. \tag{22.10}$$

此公式可以这样导出：利用对易关系(22.1)把$\mathrm{Sp}\gamma^{\lambda}\gamma^{\mu}\gamma^{\nu}\gamma^{\rho}$中的因子$\gamma^{\lambda}$换到右边，每换位一次，在式(22.10)中就多出一项：

$$T^{\lambda\mu\nu\rho}=2g^{\lambda\mu}T^{\nu\rho}-T^{\mu\lambda\nu\rho}=2g^{\lambda\mu}g^{\nu\rho}-T^{\mu\lambda\nu\rho},$$

全部换位以后，右边剩下$-T^{\mu\nu\rho\lambda}=-T^{\lambda\mu\nu\rho}$，再把它移到左边．用这种方法，六个$\gamma$乘积之迹的计算就化为计算四个$\gamma$乘积之迹，……，例如，

$$T^{\lambda\mu\nu\rho\sigma\tau}=g^{\lambda\mu}T^{\nu\rho\sigma\tau}-g^{\lambda\nu}T^{\mu\rho\sigma\tau}+g^{\lambda\rho}T^{\mu\nu\sigma\tau}-g^{\lambda\sigma}T^{\mu\nu\rho\tau}+g^{\lambda\tau}T^{\mu\nu\rho\sigma}. \tag{22.11}$$

从以上公式可明显地看出，只要每个矩阵$\gamma^0,\gamma^1,\cdots$在乘积中出现偶数次，迹$T^{\lambda\mu\cdots}$就都是实的且不为零．我们也不难发现，当全部因子的次序颠倒过来时，迹不改变：

$$T^{\lambda\mu\cdots\rho\sigma}=T^{\sigma\rho\cdots\mu\lambda}. \tag{22.12}$$

如上所述，因子$\gamma$通常出现在同各种四维矢量的“标量积”中．在这种情况下，像公式(22.9)和(22.10)，就意味着

$$\frac{1}{4}\mathrm{Sp}(a\gamma)(b\gamma)=ab, \tag{22.13}$$

$$\frac{1}{4}\mathrm{Sp}(a\gamma)(b\gamma)(c\gamma)(d\gamma)=(ab)(cd)-(ac)(bd)+(ad)(bc).$$

乘积$\gamma^0\gamma^1\gamma^2\gamma^3$具有特别的重要性，通常给它以专门符号．

$$\gamma^5=-\mathrm{i}\gamma^0\gamma^1\gamma^2\gamma^3. \tag{22.14}$$

容易看出，

$$\gamma^5\gamma^\mu+\gamma^\mu\gamma^5=0,\quad(\gamma^5)^2=1, \tag{22.15}$$

即矩阵$\gamma^5$与所有的$\gamma^\mu$反对易．对矩阵$\boldsymbol{\alpha}$和$\beta$，有对易规则

$$\boldsymbol{\alpha}\gamma^5-\gamma^5\boldsymbol{\alpha}=0,\quad\beta\gamma^5+\gamma^5\beta=0 \tag{22.16}$$

（与$\boldsymbol{\alpha}$的对易性来源于$\boldsymbol{\alpha}=\gamma^0\boldsymbol{\gamma}$是两个矩阵$\gamma^\mu$的乘积）．

矩阵$\gamma^5$是厄密的；实际上，

$$\gamma^{5+}=i\gamma^{3+}\gamma^{2+}\gamma^{1+}\gamma^{0+}=-i\gamma^{3}\gamma^{2}\gamma^{1}\gamma^{0},$$

因为从次序 3210 到次序 0123 是经过偶数次换位，所以

$$\gamma^{5+}=\gamma^{5}. \tag{22.17}$$

这个矩阵在两个具体表象中的形式是：

$$\text{旋量表象}\qquad \gamma^{5}=\begin{pmatrix}-1 & 0\\ 0 & 1\end{pmatrix};$$

$$\text{标准表象}\qquad \gamma^{5}=\begin{pmatrix}0 & -1\\ -1 & 0\end{pmatrix}. \tag{22.18}$$

矩阵 $\gamma^5$ 的迹为零：

$$\gamma^{5}=0 \tag{22.19}$$

[根据式(22.18)，这是显而易见的]. 乘积 $\gamma^5\gamma^\mu\gamma^\nu$ 之迹也等于零. 而对 $\gamma^5$ 与 4 个因子 $\gamma^\mu$ 的乘积，我们有

$$\frac{1}{4}\mathrm{Sp}\gamma^{5}\gamma^{\lambda}\gamma^{\mu}\gamma^{\nu}\gamma^{\rho}=ie^{\lambda\mu\nu\rho}. \tag{22.20}$$

另外还有公式

$$\gamma N=i\gamma^{5}(\gamma a)(\gamma b)(\gamma c),\qquad N^{\lambda}=e^{\lambda\mu\nu\rho}a_{\mu}a_{\nu}a_{\rho}, \tag{22.21}$$

对相互正交的四维矢量$a, b, c$ ($ab=bc=ac=0$)而言，公式(22.21)是正确的.

在某些情况下(出现非相对论性粒子的问题中)，可能需要计算分别含有 $\gamma^0$ 和三维"矢量"$\boldsymbol{\gamma}$ 的乘积之迹. 只有偶数个 $\gamma^0$ 和 $\boldsymbol{\gamma}$ 因子的乘积之迹不为零. 这时所有的因子 $\gamma^0$ 缩并为 1，而且有两个和四个 $\boldsymbol{\gamma}$ 的乘积之迹由下列公式给出：

$$\frac{1}{4}\mathrm{Sp}(\boldsymbol{a}\cdot\boldsymbol{\gamma})(\boldsymbol{b}\cdot\boldsymbol{\gamma})=-\boldsymbol{ab},$$

$$\frac{1}{4}\mathrm{Sp}(\boldsymbol{a}\cdot\boldsymbol{\gamma})(\boldsymbol{b}\cdot\boldsymbol{\gamma})(\boldsymbol{c}\cdot\boldsymbol{\gamma})(\boldsymbol{d}\cdot\boldsymbol{\gamma})=(\boldsymbol{a}\cdot\boldsymbol{b})(\boldsymbol{c}\cdot\boldsymbol{d})-(\boldsymbol{a}\cdot\boldsymbol{c})(\boldsymbol{b}\cdot\boldsymbol{d})+(\boldsymbol{a}\cdot\boldsymbol{d})(\boldsymbol{b}\cdot\boldsymbol{c}). \tag{22.22}$$

## § 23. 平面波

一个具有确定动量和能量的自由粒子的状态用形式为

$$\psi_p=\frac{1}{\sqrt{2\varepsilon}}u_p e^{-ipx} \tag{23.1}$$

的平面波描述．指标 $p$ 表示四维动量的值．波幅 $u_p$ 是相应地归一化的双旋量．

在进一步二次量子化时，除了波函类(23.1)外，还要有“负频率”的波函数；正如 § 11 所述，它是由于根的双值性 $\pm\sqrt{p^2+m^2}$ 而出现在相对论性理论中．和 § 11 中一样，我们将把 $\varepsilon$ 取作正量 $\varepsilon=+\sqrt{\boldsymbol{p}^2+m^2}$，因而“负频率”对应 $-\varepsilon$；同样，改变 $\boldsymbol{p}$ 的符号我们得到一个函数，把它自然地记作 $\psi_{-p}$：

$$\psi_{-p}=\frac{1}{\sqrt{2\varepsilon}}u_{-p}e^{ipx}. \tag{23.2}$$

这两个函数的意义将在 § 26 中阐述．下面我们将同时给出 $\psi_p$ 和 $\psi_{-p}$ 的公式．

双旋量振幅 $u_p$ 和 $u_{-p}$ 的分量满足代数方程组

$$(\gamma p-m)u_p=0,\quad (\gamma p+m)u_{-p}=0, \tag{23.3}$$

这些方程组是把式(23.1)和(23.2)代入狄拉克方程得到的(这等价于在狄拉克方程中用 $\pm p$ 代替算符 $\hat{p}$)①．这时，关系式 $p^2=m^2$ 是每一方程组的相容性条件．我们将始终根据不变性条件

$$\bar{u}_p u_p=2m,\quad \bar{u}_{-p}u_{-p}=-2m \tag{23.4}$$

对双旋量振幅归一化(和别处一样，字母上方的短划表示狄拉克共轭：$\bar{u}=u^*\gamma^0$)．方程(23.3)左乘以 $\bar{u}_{\pm p}$ 得到 $(\bar{u}_{\pm p}\gamma u_{\pm p})p=2m^2=2p^2$，由此可见，

---

① 对复共轭函数，也可根据狄拉克方程(21.9)写出类似的方程组：

$$\bar{u}_p(\gamma p-m)=0,\bar{u}_{-p}(\gamma p+m)=0. \tag{23.3a}$$

$$\bar{u}_p\gamma u_p = \bar{u}_{-p}\gamma u_{-p} = 2p. \tag{23.5}$$

我们看到，由 $u_p$ 的公式过渡到 $u_{-p}$ 的公式只需改变 $m$ 的符号.

四维流密度矢量是

$$j = \bar{\psi}_{\pm p}\gamma\psi_{\pm p} = \frac{1}{2\varepsilon}\bar{u}_{\pm p}\gamma u_{\pm p} = \frac{p}{\varepsilon}, \tag{23.6}$$

即 $j^\mu = (1, \boldsymbol{v})$，这里 $\boldsymbol{v} = \boldsymbol{p}/\varepsilon$ 是粒子的速度. 由此可见，函数 $\psi_p$ 归一化为"$V=1$ 的体积中有一个粒子".

由方程(23.3)可知，波幅的分量是相互有关系的，这种关系的具体形式当然依赖于怎样选取 $\psi$ 的表象. 让我们对于标准表象来求这种关系.

根据方程(21.19)，对平面波我们有

$$(\varepsilon - m)\varphi - \boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{\sigma}\chi = 0, \quad (\varepsilon + m)\chi - \boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{\sigma}\varphi = 0. \tag{23.7}$$

从这两个等式我们求出 $\varphi$ 和 $\chi$ 之间的两种等价的关系式：

$$\varphi = \frac{\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{\sigma}}{\varepsilon - m}\chi, \quad \chi = \frac{\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{\sigma}}{\varepsilon + m}\varphi \tag{23.8}$$

(这两个公式的等价性很明显：其中第一个左乘以 $\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{\sigma}/(\varepsilon+m)$；考虑到 $(\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{\sigma})^2 = \boldsymbol{p}^2$ 和 $\varepsilon^2 - m^2 = \boldsymbol{p}^2$ 就得到第二个). $\varphi$ 和 $\chi$ 中公共因子的选择应该满足归一化条件(23.4). 结果，我们得到 $u_p$(以及 $u_{-p}$)的下列表达式：

$$u_p = \begin{pmatrix} \sqrt{\varepsilon + m}\, w \\ \sqrt{\varepsilon - m}\,(\boldsymbol{n}\cdot\boldsymbol{\sigma})w \end{pmatrix}, \quad u_{-p} = \begin{pmatrix} \sqrt{\varepsilon - m}\,(\boldsymbol{n}\cdot\boldsymbol{\sigma})w' \\ \sqrt{\varepsilon + m}\, w' \end{pmatrix} \tag{23.9}$$

[第二个公式是通过改变第一个公式中 $m$ 前的符号并进行代换 $w \to (\boldsymbol{n}\cdot\boldsymbol{\sigma})w'$ 得到的]. 这里 $\boldsymbol{n}$ 是矢量 $\boldsymbol{p}$ 的基矢，而 $w$ 是具有任意两分量的量，它只满足归一化条件

$$w^* w = 1. \tag{23.10}$$

对于 $\bar{u} = u^*\gamma^0$[$\gamma^0$ 根据式(21.20)]，我们有

$$\begin{aligned} \bar{u}_p &= (\sqrt{\varepsilon + m}\, w^*, \ -\sqrt{\varepsilon - m}\, w^*(\boldsymbol{n}\cdot\boldsymbol{\sigma})), \\ \bar{u}_{-p} &= (\sqrt{\varepsilon - m}\, w'^*(\boldsymbol{n}\cdot\boldsymbol{\sigma}), -\sqrt{\varepsilon + m}\, w'^*), \end{aligned} \tag{23.11}$$

并相乘，使我们确信 $\bar{u}_{\pm p}u_{\pm p}=\pm 2m$.

在静止参考系中，$\varepsilon=m$，我们有

$$u_p=\sqrt{2m}\begin{pmatrix} w \\ 0 \end{pmatrix},\qquad u_{-p}=\sqrt{2m}\begin{pmatrix} 0 \\ w' \end{pmatrix}, \tag{23.12}$$

即 $w$ 是三维旋量．在非相对论极限下，每一个波的振幅都化为 $w$. 我们看到，在静止参考系中，双旋量 $u_{-p}$ 中为零的是前两个分量，而不是后两个．具有“负频率”的狄拉克方程的解的这个性质是很明显的：在(23.7)中当 $\boldsymbol{p}=0$ 并进行代换 $\varepsilon\to -m$，我们得到的是 $\varphi=0$①.

平面波的振幅包含一个任意的两分量的量．那么，在动量一定的条件下，存在着两种不同的独立状态，对应于两种可能的自旋分量值．但是，自旋在任意 $z$ 轴上的分量不可能具有确定值．这是很显然的，因为具有一定 $\boldsymbol{p}$ 的粒子的哈密顿算符(即矩阵 $H=$ $\cdot\boldsymbol{p}+\beta m$)与矩阵 $\Sigma_z=-\mathrm{i}\alpha_x\alpha_y$ 不对易．但是，根据 § 16 中所做出的一般结论，螺旋性 $\lambda$——自旋在 $\boldsymbol{p}$ 方向上的分量守恒：哈密顿算符与矩阵 $\boldsymbol{n}\cdot\boldsymbol{\Sigma}$ 对易.

螺旋性状态对应着平面波，在这样的平面波中，三维旋量 $w=w^{(\lambda)}(\boldsymbol{n})$ 是算符 $\boldsymbol{n}\cdot\sigma$ 的本征函数：

$$\frac{1}{2}(\boldsymbol{n}\cdot\sigma)w^{(\lambda)}=\lambda w^{(\lambda)}. \tag{23.13}$$

这两个旋量的明显形式是

$$w^{(\lambda=1/2)}=\begin{pmatrix} \mathrm{e}^{-i\varphi/2}\cos\dfrac{\theta}{2} \\ \mathrm{e}^{i\varphi/2}\sin\dfrac{\theta}{2} \end{pmatrix},\quad w^{(\lambda=-1/2)}=\begin{pmatrix} -\mathrm{e}^{-i\varphi/2}\sin\dfrac{\theta}{2} \\ \mathrm{e}^{i\varphi/2}\cos\dfrac{\theta}{2} \end{pmatrix}, \tag{23.14}$$

---

① 在旋量表象中我们有 $\xi=-\eta$ 而不是 $\xi=\eta$，后者对静止参考系中具有“正频率”的解是正确的.

式中 $\theta$ 和 $\varphi$ 是方向 $n$ 对固定轴 $xyz$ 的极角和方位角①.

具有一定 $\boldsymbol{p}$ 的自由粒子的两种独立状态的另一种可能选择(比较简单,但不太直观),是让它们对应静止参考系中自旋 $z$ 轴分量的两个值,我们用 $\sigma$ 表示. 相应的旋量是:

$$w^{(\sigma=1/2)}=\begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix},\quad w^{(\sigma=-1/2)}=\begin{pmatrix}0\\1\end{pmatrix}. \tag{23.15}$$

作为带有"负频率"的两个线性独立解,我们取其三维旋量为

$$w^{(\sigma)\prime}=-\sigma_y w^{(-\sigma)}=2\sigma i w^{(\sigma)} \tag{23.16}$$

的平面波(这种选择的意义将在 § 26 中阐述).

可以找到这样一种平面波表象,其中平面波在任何参考系(而不只是静止参考系)内只有两个分量对应着同一物理特性(在静止参考系内是自旋分量)的两个确定值 (L. Foldy, S. A. Wouthuysen, 1950).

根据标准表象中的振幅 $u_p$(23.9),我们来求这种表象的么正变换:

$$u_p'=Uu_p,\quad U=e^{w\gamma\cdot n},$$

这里 $w$ 是实数量. 因为 $\gamma^+=-\gamma$, 所以有 $U^+=U^{-1}$. 展成级数并考虑到 $(\gamma\cdot\boldsymbol{n})^2=-1$, $U$ 可以表示成

$$U=\cos w+\gamma\cdot\boldsymbol{n}\sin w$$

[比较从式(18.13)到(18.14)的过渡]. 根据变换振幅 $u_p'$ 中后两个分量为零的条件,我们求出

$$\operatorname{tg} w=\frac{|\boldsymbol{p}|}{m+\varepsilon},$$

因而

$$U=\frac{m+\varepsilon+(\gamma\cdot\boldsymbol{n})|\boldsymbol{p}|}{\sqrt{2\varepsilon(\varepsilon+m)}}.$$

① 方程(23.13)的解容许乘以任意相因子,这与绕方向 $\boldsymbol{n}$ 可以有任意转动有关.

在新的表象中，

$$u'_p=\sqrt{2\varepsilon}\begin{pmatrix}w\\0\end{pmatrix}. \tag{23.17}$$

在这个表象中，粒子的哈密顿算符取如下形式:

$$\hat{H}'=U(\boldsymbol{\alpha}\cdot\boldsymbol{p}+\beta m)U^{-1}=\beta\varepsilon \tag{23.18}$$

($\beta,\boldsymbol{\alpha},\boldsymbol{\gamma}$ 都是标准表象中的矩阵). 这个哈密顿算符与矩阵

$$\boldsymbol{\Sigma}=-\boldsymbol{\alpha}\gamma^5=\begin{pmatrix}\boldsymbol{\sigma} & 0\\0 & \boldsymbol{\sigma}\end{pmatrix}$$

对易，$\boldsymbol{\Sigma}$是新表象中的守恒量——静止参考系中的自旋的算符.

## § 24. 球面波

一个具有确定角动量 $j$ 的自由粒子(自旋为1/2)，其状态波函数是旋量球面波. 为了确定这种球面波的形式，我们首先回顾一下非相对论性理论中的类似公式.

非相对论性波函数是三维旋量 $\psi=\begin{pmatrix}\psi^1\\\psi^2\end{pmatrix}$. 具有确定能量$\varepsilon$(因而也具有确定的动量 $p$①)、轨道角动量 $l$、总角动量 $j$ 及其分量 $m$ 的状态，由波函数

$$\psi=R_{pl}(r)\Omega_{jlm}(\theta,\varphi) \tag{24.1}$$

描述. 波函数的角度部分 $\Omega_{jlm}$ 是三维旋量，其分量 ($l$ 给定后有两个可能的 $j$ 值: $j=l\pm1/2$)公式为

$$\Omega_{l+1/2,l,m}=\begin{pmatrix}\sqrt{\dfrac{j+m}{2j}}Y_{l,m-1/2}\\\sqrt{\dfrac{j-m}{2j}}Y_{l,m+1/2}\end{pmatrix}, \tag{24.2}$$

① 在本节中，$p$表示$|\boldsymbol{p}|$.

$$\Omega_{l-1/2,l,m}=\begin{pmatrix} -\sqrt{\frac{j-m+1}{2j+2}}Y_{l,m-1/2} \\ \sqrt{\frac{j+m+1}{2j+2}}Y_{l,m+1/2} \end{pmatrix}$$

(参看第三卷 § 106，习题). 我们称 $\Omega_{jlm}$ 为**球旋量**，它的归一化条件是

$$\int \Omega^*_{jlm}\Omega_{j'l'm'}\mathrm{d}o=\delta_{jj'}\delta_{ll'}\delta_{mm'}. \tag{24.3}$$

而径向函数 $R_{pl}$ 是旋量 $\psi$ 的两个分量的公因子，由第三卷的公式(33.10)给出：

$$R_{pl}=\sqrt{\frac{2\pi p}{r}}J_{l+1/2}(pr) \tag{24.4}$$

它的归一化条件是

$$\int_0^\infty r^2R_{p'l}R_{pl}\mathrm{d}r=2\pi\delta(p'-p). \tag{24.5}$$

现在回到相对论情形. 我们首先指出，一个运动粒子的自旋和轨道角动量这时不再单独守恒：算符 $\hat{\boldsymbol{s}}$ 和 $\hat{\boldsymbol{l}}$ 都和哈密顿算符不对易. 但是，(对自由粒子而言)状态的宇称仍然是守恒的. 因而，量子数 $l$ 不再代表轨道角动量的确定值，但仍决定状态的宇称(见后).

我们来研究标准表象中所求的波函数（双旋量）$\psi=\begin{pmatrix}\varphi \\ \chi\end{pmatrix}$. 在转动变换下，$\varphi$ 和 $\chi$ 的行为和三维旋量相同，所以它们的角度相关性由同样的球旋量 $\Omega_{jlm}$ 给出. 令 $\varphi\sim\Omega_{jlm}$，其中 $l$ 是 $j+1/2$ 和 $j-1/2$ 两个值中确定的一个. 在反演时，$\varphi(\boldsymbol{r})\to \mathrm{i}\varphi(-\boldsymbol{r})$[参看式(21.18)]，且由于 $\Omega_{jlm}(-\boldsymbol{n})=(-1)^l\Omega_{jlm}(\boldsymbol{n})$，所以

$$\varphi(\boldsymbol{r})\longrightarrow \mathrm{i}(-1)^l\varphi(\boldsymbol{r}).$$

分量 $\chi$ 在反演时按照 $\chi(\boldsymbol{r})\longrightarrow -\mathrm{i}\chi(-\boldsymbol{r})$ 变换. 因而，为了使状态

具有确定的宇称(即所有分量在反演时都乘以相同的因子)，必须使$\chi$的角度相关性由$l$为另一可能值的球旋量$\Omega_{jl'm}$给出. 由于这两个值相差1,所以$(-1)^{l'}=-(-1)^l$.

其次,$\varphi$和$\chi$的径向相关性由同样的函数$R_{pl}$和$R_{pl'}$决定($l$和$l'$给出$\Omega_{jlm}$中所含球函数的阶数). 这是很明显的, 因为每一个$\psi$的分量都满足二阶方程$(p^2-m^2)\psi=0$, 对一个给定的$|\boldsymbol{p}|$值，这个方程变为

$$(\Delta+\boldsymbol{p}^2)\psi=0,$$

这与自由粒子的非相对论性薛定谔方程在形式上完全一致.

由此可见，

$$\varphi=AR_{pl}\Omega_{jlm},\quad \chi=BR_{pl'}\Omega_{jl'm}, \tag{24.6}$$

剩下的问题是决定常系数$A$和$B$. 为此，我们考虑一个遥远的区域，在那里，球面波可以看成平面波. 按照第三卷的渐近公式(33.12)

$$R_{pl}\approx\frac{1}{\mathrm{i}r}\left\{\mathrm{e}^{\mathrm{i}\left(pr-\frac{\pi l}{2}\right)}-\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\left(pr-\frac{\pi l}{2}\right)}\right\}, \tag{24.7}$$

因而$\varphi$是在方向$\pm\boldsymbol{n}(\boldsymbol{n}=\boldsymbol{r}/r)$上传播的两个平面波之差. 按照式(23.8),对于它们中的每一个,我们有

$$\chi=\frac{p}{\varepsilon+m}(\pm\boldsymbol{n}\cdot\boldsymbol{\sigma})\varphi.$$

根据上述[公式(24.6)],显然有$(\boldsymbol{n}\cdot\boldsymbol{\sigma})\Omega_{jlm}=a\Omega_{jl'm'}$,这里$a$为常数. 这个常数很容易确定,当$m=1/2$且方向$\boldsymbol{n}$沿$z$轴时,比较这个等式的两边,即可定出$a$. 利用(7.2a),我们求出

$$(\boldsymbol{n}\cdot\boldsymbol{\sigma})\Omega_{jlm}=i^{l'-l}\Omega_{jl'm'}. \tag{24.8}$$

将所得公式汇总起来并与(24.6)比较,我们得到

$$B=-\frac{p}{\varepsilon+m}A.$$

最后,系数$A$由$\psi$的总归一化决定. 按照条件

$$\int \psi^*_{pjlm}\psi_{p'j'l'm'}d^3x = 2\pi\delta_{jj'}\delta_{ll'}\delta_{mm'}\delta(p-p') \quad (24.9)$$

对 $\psi$ 归一化，最后我们求出

$$\psi_{pjlm} = \frac{1}{\sqrt{2\varepsilon}}\begin{pmatrix}\sqrt{\varepsilon+m}\,R_{pl}\Omega_{jlm} \\ -\sqrt{\varepsilon-m}\,R_{pl'}\Omega_{jl'm}\end{pmatrix}, \quad l' = 2j - l. \quad (24.10)$$

由此可见，当 $j$ 和 $m$(以及能量 $\varepsilon$)的值给定后，有两种字称不同的状态．字称由量子数 $l$ 单值地决定，$l$ 的取值是 $j\pm1/2$：反演时双旋量(24.10)乘以 $i(-1)^l$．但是，这个双旋量的分量含有阶数为 $l$ 和 $l'$的两种球函数，表明轨道角动量没有确定值．

当 $r\to\infty$ 时，在每一个不大的空间区域内，球面波(24.7)可以看成动量为 $\boldsymbol{p}=\pm p\boldsymbol{n}$ 的平面波．所以很清楚，动量表象中的波函数与(24.10)的差别从本质上讲，只在于没有径向因子和赋予 $\boldsymbol{n}$以动量指向的意义．

为了直接过渡到动量表象，必须进行傅里叶变换：

$$\psi(\boldsymbol{p}') = \int \psi(\boldsymbol{r})e^{-i\boldsymbol{p}'\cdot\boldsymbol{r}}d^3x. \quad (24.11)$$

积分计算借助平面波展成球面波的公式[参看第三卷式(34.3)]：

$$e^{i\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{r}} = \frac{2\pi}{p}\sum_{l=0}^{\infty}\sum_{m=-l}^{l} i^l R_{pl}(r)Y^*_{lm}\left(\frac{\boldsymbol{p}}{p}\right)Y_{lm}\left(\frac{\boldsymbol{r}}{r}\right). \quad (24.12)$$

将式(24.11)中的因子 $e^{-i\boldsymbol{p}'\cdot\boldsymbol{r}}$这样展开，考虑到式(24.5)，我们求出函数

$$\psi(\boldsymbol{r}) = R_{pl}(r)\Omega_{jlm}\left(\frac{\boldsymbol{r}}{r}\right)$$

的傅里叶分量为

$$\psi(\boldsymbol{p}') = \frac{(2\pi)^2}{p}\delta(p'-p)i^{-l}Y_{lm'}\left(\frac{\boldsymbol{p}'}{p'}\right)\int \Omega_{jlm}\left(\frac{\boldsymbol{r}}{r}\right)Y^*_{lm'}\left(\frac{\boldsymbol{r}}{r}\right)do.$$

这里的积分等于球旋量定义(24.2)中球函数的系数，与因子 $Y_{lm'}(\boldsymbol{p}'/p')$一起重新形成同样的球旋量，但宗量变成了 $\boldsymbol{p}'/p'$：

$$\psi(\boldsymbol{p}')=\frac{(2\pi)^2}{p}\delta(p'-p)\mathrm{i}^{-l}\Omega_{jlm}\left(\frac{\boldsymbol{p}'}{p'}\right).$$

对双旋量波函数(24.10)应用这个结果，我们得到它的动量表象：

$$\psi_{pjlm}(\boldsymbol{p}')=\delta(p'-p)\frac{(2\pi)^2}{p\sqrt{2\varepsilon}}\begin{pmatrix}\sqrt{\varepsilon+m}\,\mathrm{i}^{-l}\Omega_{jlm}(\boldsymbol{p}'/p')\\ \sqrt{\varepsilon-m}\,\mathrm{i}^{-l'}\,\Omega_{jl'm}(\boldsymbol{p}'/p')\end{pmatrix}.$$

(24.13)

状态$|pjlm\rangle$与§16中所研究过的状态$|pjm|\lambda|\rangle$(这里$|\lambda|=1/2$)是一样的：两者都具有确定的$pjm$值和宇称．所以，球旋量$\Omega_{jlm}$可以通过函数$D^{(j)}_{\lambda m}$来表达(它们的宗量都是$\boldsymbol{p}/p$)．当$p\to 0$时，波函数(24.13)化为三维旋量$\Omega_{jlm}$，其宇称为$P=\eta(-1)^l$(这里$\eta=i$是旋量的"内禀宇称")．与§16的结果比较，可以得出下面的公式：

$$\Omega_{jlm}=\mathrm{i}^l\sqrt{\frac{2j+1}{8\pi}}\left(w^{(-1/2)}D^{(j)}_{-1/2m}\pm w^{(1/2)}D^{(j)}_{1/2m}\right)\quad(24.14)$$

式中$l=j\mp 1/2$，$w^{(\lambda)}$为三维旋量(23.14)．

## §25. 自旋和统计学的关系

自旋为1/2的粒子的场(旋量场)的二次量子化与§11中标量场的二次量子化是一样的．

毋须重复整个讨论，我们立即就能写出和公式(11.2)完全相似的场算符表达式：

$$\hat{\psi}=\sum_{p\cdot\sigma}\frac{1}{\sqrt{2\varepsilon}}(\hat{a}_{p\cdot\sigma}u_{p\sigma}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}px}+\hat{b}^{+}_{p\cdot\sigma}u_{-p-\sigma}\mathrm{e}^{\mathrm{i}px})$$

(25.1)

$$\hat{\bar{\psi}}\equiv\hat{\psi}^{+}\gamma^0=\sum_{p\cdot\sigma}\frac{1}{\sqrt{2\varepsilon}}(\hat{a}^{+}_{p\cdot\sigma}\bar{u}_{p\sigma}\mathrm{e}^{\mathrm{i}px}+\hat{b}_{p\cdot\sigma}\bar{u}_{-p-\sigma}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}px});$$

对动量 $\boldsymbol{p}$ 的所有值和 $\sigma=\pm 1/2$求和. 反粒子的湮灭算符$\hat{b}_{\boldsymbol{p}\cdot\sigma}$(和粒子的湮灭算符$\hat{a}_{\boldsymbol{p}\cdot\sigma}$一样)以函数项的系数形式出现,这个与坐标相关的函数($e^{i\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{r}}$)对应着动量为 $\boldsymbol{p}$ 的状态①.

为了计算旋量场的哈密顿算符, 不必确定场的能量-动量张量(我们对标量场也曾如此), 因为在这种情况下存在着一个粒子的哈密顿量,借助它可以导出波动方程(狄拉克方程)(21. 12). 这个粒子在波函数为 $\psi$ 的状态中的平均能量是积分

$$\int \psi^* \hat{H} \psi \mathrm{d}^3 x = i\int \psi^* \frac{\partial \psi}{\partial t} \mathrm{d}^3 x = \mathrm{i} \int \bar{\psi} \gamma^0 \frac{\partial \psi}{\partial t} \mathrm{d}^3 x. \tag{25.2}$$

应该注意的是,"能量密度"(被积函数)在这里不是正定量.

在式(25.2)中把函数 $\psi$ 和 $\bar{\psi}$ 换成 $\psi$-算符, 考虑到具有不同 $\boldsymbol{p}$ 或 $\sigma$ 的波函数相互正交, 并且应用波振幅的关系式 $\bar{u}_{\pm p\sigma}\gamma^0 u_{\pm p\sigma}=2\varepsilon$,我们得到场的哈密顿算符为

$$\hat{H}=\sum_{\boldsymbol{p}\cdot\sigma} \varepsilon\left(\hat{a}_{\boldsymbol{p}\cdot\sigma}^{+} \hat{a}_{\boldsymbol{p}\cdot\sigma}-\hat{b}_{\boldsymbol{p}\cdot\sigma} \hat{b}_{\boldsymbol{p}\cdot\sigma}^{+}\right). \tag{25.3}$$

可见,这时应该用费米量子化:

$$\{\hat{a}_{\boldsymbol{p}\cdot\sigma}, \hat{a}_{\boldsymbol{p}\cdot\sigma}^{+}\}_{+}=1, \quad \{\hat{b}_{\boldsymbol{p}\cdot\sigma}, \hat{b}_{\boldsymbol{p}\cdot\sigma}^{+}\}_{+}=1, \tag{25.4}$$

而其余各对算符 $\hat{a}, \hat{a}^{+}, \hat{b}, \hat{b}^{+}$ 都是反对易的(参看第三卷, §65). 实际上,哈密顿算符(25.3)这时可以改写成

$$\hat{H}=\sum_{\boldsymbol{p}\cdot\sigma} \varepsilon\left(\hat{a}_{\boldsymbol{p}\cdot\sigma}^{+} \hat{a}_{\boldsymbol{p}\cdot\sigma}+\hat{b}_{\boldsymbol{p}\cdot\sigma}^{+} \hat{b}_{\boldsymbol{p}\cdot\sigma}-1\right),$$

而能量本征值(和通常一样,略去无限大的相加常数)为

$$E=\sum_{\boldsymbol{p}\cdot\sigma} \varepsilon\left(N_{\boldsymbol{p}\cdot\sigma}+\bar{N}_{\boldsymbol{p}\cdot\sigma}\right), \tag{25.5}$$

它应该是,也确实是正定量. 而在玻色量子化时,根据(25.3), 我们将得到本征值

---

① 两个函数都对应着静止参考系中的同一自旋分量值 $\sigma$; 对于函数 $\bar{\psi}_{-p-\sigma}$, 这点将在 §26 中证明,参看(26.10).

$$\Sigma \varepsilon (N_{p,\sigma} - \bar{N}_{p,\sigma}),$$

它不是正定量，因而没有意义.

对于系统的动量，即算符$\int \hat{\psi}^{+} \hat{p} \hat{\psi} \mathrm{d}^3 x$的本征值，可以得到一个和式(25.5)类似的表达式:

$$\boldsymbol{P} = \sum_{p,\sigma} \boldsymbol{p} (N_{p,\sigma} + \bar{N}_{p,\sigma}) \tag{25.6}$$

四维流算符是

$$j^{\mu} = \hat{\bar{\psi}} \gamma^{\mu} \hat{\psi}, \tag{25.7}$$

而求得场的“电荷”算符为

$$\begin{aligned} \hat{Q} = \int \hat{\bar{\psi}} \gamma^0 \hat{\psi} \mathrm{d}^3 x &= \sum_{p,\sigma} (\hat{a}^{+}_{p,\sigma} \hat{a}_{p,\sigma} + \hat{b}_{p,\sigma} \hat{b}^{+}_{p,\sigma}) \\ &= \sum_{p,\sigma} (\hat{a}^{+}_{p,\sigma} \hat{a}_{p,\sigma} - \hat{b}^{+}_{p,\sigma} \hat{b}_{p,\sigma} + 1), \end{aligned} \tag{25.8}$$

其本征值为

$$Q = \sum_{p,\sigma} (N_{p,\sigma} - \bar{N}_{p,\sigma}). \tag{25.9}$$

这样，我们又得到了粒子和反粒子的概念，§ 11 中与此有关的全部讨论在这里也适用.

然而，零自旋粒子是玻色子，而自旋为 1/2 的粒子是费米子. 如果仔细研究这种差别的形式根源，就会看到差别的产生是由于标量场和旋量场的“能量密度”表达式的性质不同. 在标量场的情况下，这个表达式是正定的，因而哈密顿算符(11. 3)中的两项($\hat{a}^{+}\hat{a}$和$\hat{b}\hat{b}^{+}$)都是正号，为了保证能量本征值为正，代换$\hat{b}\hat{b}^{+} \longrightarrow \hat{b}^{+}\hat{b}$应该不改变符号，即按照玻色对易法则进行. 而在旋量场的情形下，“能量密度”不是正定量，因而哈密顿算符(25. 3)中的项$\hat{b}\hat{b}^{+}$是负号；为了得到正的本征值，代换$\hat{b}\hat{b}^{+} \longrightarrow \hat{b}^{+}\hat{b}$应该伴随着符号的改变，即按费米子对易法则进行.

另一方面，能量密度的形式直接依赖于波函数的变换性质和相对论不变性的要求．在这个意义上可以说，自旋与粒子所遵守的统计学的关系也是这些要求的直接结果．

从自旋为 1/2 的粒子是费米子这一事实也可以得出普遍的结论：一切半整数自旋粒子都是费米子，而整数自旋粒子都是玻色子(包括零自旋粒子，在§11 中曾证明)①.

这是很显然的，因为自旋为 $s$ 的粒子可以想像成是由$2s$个1/2自旋粒子“组成”的．当 $s$ 为半整数时，$2s$ 为奇数，$s$ 为整数时 $2s$ 为偶数．包含偶数个费米子的“复合”粒子是玻色子，而包含奇数个费米子的“复合”粒子是费米子②.

如果系统由不同种粒子组成，那么对每一种粒子应该分别定义其产生算符和湮灭算符．这时，属于不同玻色子的算符或属于玻色子和费米子的算符互相对易．至于属于不同费米子的算符，在非相对论性理论中，可以认为它们或者是对易的，或者是反对易的(第三卷，§65)．在相对论性理论中，容许粒子互相转变，不同的费米子，其产生算符和湮灭算符必须看作是反对易的，就如同属于同一费米子的不同状态一样．

## 习　题

求旋量场的拉格朗日算符．

**解**　与狄拉克方程相适应的拉格朗日函数由实标量表达式给出：

$$L=\frac{i}{2}(\bar{\psi}\gamma^{\mu}\partial_{\mu}\psi-\partial_{\mu}\bar{\psi}\cdot\gamma^{\mu}\psi)-m\bar{\psi}\psi. \tag{1}$$

---

① 粒子的自旋与它所遵守的统计学的关系的起源，是泡利(W. Pauli)首先阐明的(1940).

② 这里假设所有自旋相同的粒子遵守相同的统计学（不管它们的“组成”方法如何)．这种假设的正确性可由如下的论证看出：譬如说，假若存在着自旋为零的费米子，那么，由一个自旋为零的费米子和一个自旋为 1/2 的费米子将组成一个自旋为1/2的粒子，它应该是玻色子，这与对 1/2 自旋所证明过的一般结论相矛盾．

取 $\psi$ 和 $\bar{\psi}$ 的分量为"广义坐标"$q$，容易证明，相应的拉格朗日方程(10.10)与 $\psi$ 和 $\bar{\psi}$ 的狄拉克方程相同. 拉格朗日函数的总符号(如同它的总系数一样)是任意的. 由于 $L$ 是 $\psi$ 和 $\bar{\psi}$ 的微商的一次式，作用量 $S=\int L\mathrm{d}^4x$ 在任何情况下都不会有极小值或极大值. 这时条件 $\delta S=0$ 所决定的只是积分的稳定点，而不是极值.

在(1)中用算符 $\hat{\psi}$ 代替 $\psi$，就得到旋量场的拉格朗日算符. 对公式(12.12)应用这个拉格朗日算符，便求出流算符(25.7).

## § 26. 电荷共轭和旋量的时间反演

(25.1) 中与算符 $\hat{a}_{p\sigma}$ 相乘的因子 $\psi_{p\sigma}=u_{p\sigma}e^{-ipx}$ 是动量为 $\boldsymbol{p}$、极化为 $\sigma$ 的自由粒子(例如说，电子)的波函数：

$$\psi_{p\sigma}^{(e)}=\psi_{p\sigma}.$$

而与算符 $\hat{b}_{p\sigma}$ 相乘的因子 $\bar{\psi}_{-p-\sigma}$ 必须看成是具有同样 $\boldsymbol{p}$、$\sigma$ 的正电子的波函数. 但是这时电子和正电子的波函数是在不同的双旋量表象中表示的. 这是很明显的，因为 $\psi$ 和 $\bar{\psi}$ 的变换性质不同，它们的分量满足不同的方程组. 为了消除这个缺点，必须对分量 $\bar{\psi}_{-p-\sigma}$ 进行一定的幺正变换，使新的四分量函数满足和 $\psi_{p\sigma}$ 相同的方程①. 这样的函数我们称之为(动量为 $\boldsymbol{p}$，极化为 $\sigma$ 的)正电子的波函数. 用 $U_C$ 表示所要求的幺正变换矩阵，我们写出

$$\psi_{p\sigma}^{(p)}=U_C\bar{\psi}_{-p-\sigma}. \tag{26.1}$$

由 $\psi_{-p-\sigma}$ 形成这个函数的运算 $C$ 叫波函数的**电荷共轭** (H. A. Kramers, 1937). 当然，这个概念的应用并不限于平面波. 任何函数 $\psi$ 都有一个"电荷共轭"函数

$$\hat{C}\psi(t,\boldsymbol{r})=U_C\bar{\psi}(t,\boldsymbol{r}), \tag{26.2}$$

它和 $\psi$ 一样变换，并满足同样的方程.

---

① 对于自旋为零的粒子，一般不会产生这个问题，因为标量函数 $\psi$ 和 $\psi^*$ 满足同一方程，$\psi_{-p}^*$ 和 $\psi$ 是一样的.

矩阵 $U_C$ 的性质可以根据这个定义得出. 如果 $\psi$ 是狄拉克方程 $(\gamma p-m)\psi=0$ 的解,则 $\bar{\psi}$ 满足方程

$$\bar{\psi}(\gamma p+m)=0 \qquad \text{或} \qquad (\tilde{\gamma} p+m)\bar{\psi}=0.$$

给这个方程左乘以 $U_C$:

$$U_C\tilde{\gamma} p\bar{\psi}+mU_C\bar{\psi}=0,$$

我们要求函数 $U_C\bar{\psi}$ 满足和 $\psi$ 一样的方程:

$$(\gamma p-m)U_C\bar{\psi}=0.$$

比较两个方程,我们得到 $U_C$ 和矩阵 $\gamma^\mu$ 之间如下的"对易关系"①:

$$U_C\tilde{\gamma}^\mu=-\gamma^\mu U_C. \tag{26.3}$$

我们进一步假设波函数是在旋量表象或标准表象中给出的(在本节末我们才回到任意表象的一般情形). 在这两种表象中,

$$\begin{aligned}&\gamma^{0,2}=\tilde{\gamma}^{0,2}, \quad \gamma^{1,3}=-\tilde{\gamma}^{1,3},\\ &(\gamma^{0,1,3})^*=\gamma^{0,1,3}, \quad \gamma^{2*}=-\gamma^2.\end{aligned} \tag{26.4}$$

这时,满足条件(26.3)的矩阵是 $U_C=\eta_C\gamma^2\gamma^0$, $\eta_C$ 是一个任意常数. 由 $\hat{C}^2=1$ 的要求得出 $|\eta_C|^2=1$,因而矩阵 $U_C$ 可以确定到只差一个相因子. 下面我们选 $\eta_C=1$,因而

$$U_C=\gamma^2\gamma^0=-\alpha_y. \tag{26.5}$$

再注意到 $\bar{\psi}=\psi^*\gamma^0=\tilde{\gamma}^0\psi^*=\gamma^0\psi^*$,算符 $\hat{C}$ 的作用可以写成

$$\hat{C}\psi=\gamma^2\gamma^0\bar{\psi}=\gamma^2\psi^*. \tag{26.6}$$

在旋量表象中,变换(26.6)的明显形式为

$$C: \xi^\alpha\to -\mathrm{i}\eta^{\dot{\alpha}*}, \quad \eta_{\dot{\alpha}}\to -\mathrm{i}\xi^*_\alpha, \tag{26.7a}$$

或者等价地

$$C: \xi_\alpha\to -\mathrm{i}\eta^*_{\dot{\alpha}}, \quad \eta^{\dot{\alpha}}\to -\mathrm{i}\xi^{\alpha*}. \tag{26.7b}$$

只要运用平面波的明显表式(23.9)和标准表象中的矩阵 $U_C$:

---

① 由此我们还得到等式

$$U_C\tilde{\gamma}^5=\gamma^5U_C. \tag{26.3a}$$

$$U_C=\begin{pmatrix} 0 & -\sigma_y \\ -\sigma_y & 0 \end{pmatrix}, \tag{26.8}$$

平面波 $\psi_{\pm p\sigma}$ 的电荷共轭变换是容易实行的．我们看到，

$$\sigma_y\sigma^*=-\sigma\sigma_y,$$

若按式(23.16)定义 $w^{(\sigma)\prime}$，我们就有

$$U_C\bar{u}_{-p-\sigma}=u_{p\sigma},\ U_C u_{-p-\sigma}=\bar{u}_{p\sigma}. \tag{26.9}$$

由此可见，

$$\hat{C}\psi_{-p-\sigma}=\psi_{p\sigma}, \tag{26.10}$$

因而，与算符 $\hat{b}_{p\sigma}$ 一起出现在 $\psi$－算符(25.1)中的函数 $\psi_{-p-\sigma}$ 确实对应着一个具有动量 $\boldsymbol{p}$ 和极化 $\sigma$ 的粒子的状态．我们还将看到，电子和正电子的状态用同一函数描述：

$$\psi^{(e)}_{p\sigma}=\psi^{(p)}_{p\sigma}=\psi_{p\sigma}.$$

由于函数 $\psi_{p\sigma}$ 只包含关于粒子动量和极化的信息，这是完全自然的．

可以用类似的方法研究时间反演运算．改变时间的符号，波函数应变成复共轭．为了在与原 $\psi$ 相同的表象中得到“时间反演”波函数($\hat{T}\psi$)，还必须对 $\psi^*$(或 $\bar{\psi}$) 的分量进行某种么正变换．这样，与式(26.2)类似，算符 $\hat{T}$ 对 $\psi$ 的作用可以写成

$$\hat{T}\psi(t,\boldsymbol{r})=U_T\bar{\psi}(-t,\boldsymbol{r}), \tag{26.11}$$

式中 $U_T$ 为么正矩阵．

$\psi$ 所满足的狄拉克方程为

$$\left(\mathrm{i}\gamma^0\frac{\partial}{\partial t}+\mathrm{i}\boldsymbol{\gamma}\cdot\nabla-m\right)\psi(t,\boldsymbol{r})=0,$$

$\bar{\psi}$ 所满足的狄拉克方程为

$$\left(\mathrm{i}\tilde{\gamma}^0\frac{\partial}{\partial t}+\mathrm{i}\,\widetilde{\boldsymbol{\gamma}}\cdot\nabla+m\right)\bar{\psi}(t,\boldsymbol{r})=0.$$

在后一方程中进行代换 $t\to-t$ 并左乘以 $-U_T$：

$$\left(\mathrm{i}U_T\tilde{\gamma}^0\frac{\partial}{\partial t}-\mathrm{i}U_T\widetilde{\boldsymbol{\gamma}}\cdot\nabla\right)\bar{\psi}(-t,\boldsymbol{r})-mU_T\bar{\psi}(-t,\boldsymbol{r})=0.$$

我们想使函数 $U_T\bar{\psi}(-t,\boldsymbol{r})$ 满足的方程与 $\psi(t,\boldsymbol{r})$ 的方程相同，即

$$\left(\mathrm{i}\gamma^0\frac{\partial}{\partial t}+\mathrm{i}\boldsymbol{\gamma}\cdot\nabla\right)U_T\bar{\psi}(-t,\boldsymbol{r})-mU_T\bar{\psi}(-t,\boldsymbol{r})=0.$$

比较这两个方程，我们求出矩阵 $U_T$ 应该满足的条件：

$$U_T\tilde{\gamma}^0=\gamma^0U_T,\quad U_T\widetilde{\boldsymbol{\gamma}}=-\boldsymbol{\gamma}U_T. \tag{26.12}$$

在旋量表象和标准表象中，满足这些条件的矩阵是①

$$U_T=\mathrm{i}\gamma^3\gamma^1\gamma^0. \tag{26.13}$$

由此可见，算符 $\hat{T}$ 的作用由公式

$$\hat{T}\psi(t,\boldsymbol{r})=\mathrm{i}\gamma^3\gamma^1\gamma^0\bar{\psi}(-t,\boldsymbol{r})=\mathrm{i}\gamma^3\gamma^1\psi^*(-t,\boldsymbol{r}) \tag{26.14}$$

给出．这个变换在旋量表象中的明显形式为

$$T:\ \xi^\alpha\to-\mathrm{i}\xi^*_\alpha,\quad \eta_{\dot{\alpha}}\to\mathrm{i}\eta^{\dot{\alpha}*} \tag{26.15a}$$

或

$$T:\ \xi_\alpha\to\mathrm{i}\xi^{\alpha*},\ \eta^{\dot{\alpha}}\to-\mathrm{i}\eta^*_{\dot{\alpha}} \tag{26.15b}$$

在标准表象中，

$$U_T=\begin{pmatrix}\sigma_y & 0\\ 0 & -\sigma_y\end{pmatrix}. \tag{26.16}$$

为了求出 $P,T,C$ 三种运算对 $\psi$ 的作用结果，我们依次写出

$$\hat{T}\psi(t,\boldsymbol{r})=-\mathrm{i}\gamma^1\gamma^3\psi^*(-t,\boldsymbol{r}),$$

$$\hat{P}\hat{T}\psi(t,\boldsymbol{r})=\mathrm{i}\gamma^0(\hat{T}\psi)=\gamma^0\gamma^1\gamma^3\psi^*(-t,-\boldsymbol{r}),$$

$$\hat{C}\hat{P}\hat{T}\psi(t,\boldsymbol{r})=\gamma^2(\gamma^0\gamma^1\gamma^3\psi^*)^*=\gamma^2\gamma^0\gamma^1\gamma^3\psi(-t,-\boldsymbol{r}),$$

或

$$\hat{C}\hat{P}\hat{T}\psi(t,\boldsymbol{r})=\mathrm{i}\gamma^5\psi(-t,-\boldsymbol{r}). \tag{26.17}$$

---

① 式(26.13)中相因子的选择与式(26.5)中相因子的选择有关，参看§27第一个脚注.

在旋量表象中，

$$CPT: \xi^{\alpha} \to -\mathrm{i}\xi^{\alpha}, \quad \eta_{\dot\alpha} \to \mathrm{i}\eta_{\dot\alpha} \tag{26.18}$$

[根据变换规则式 (20.4)，(26.7)，(26.15)，这也是不难证明的]①.

上面所给的矩阵 $U_C$ 和 $U_T$ 的表达式是采用 $\psi$ 的旋量表象或标准表象. 最后让我们看看这些表达式的什么性质在 $\psi$ 的任意表象中依然保持.

如果对 $\psi$ 进行幺正变换：

$$\psi' = U\psi, \quad \gamma' = U\gamma U^{-1}, \bar\psi' = \psi'^{*}\gamma^{0\prime} = \bar\psi U^{+} = \bar\psi U^{-1}, \tag{26.19}$$

那么在新表象中，

$$(\hat C\psi)' = U(C\psi) = UU_C\bar\psi = UU_C(\bar\psi' U) = UU_C\tilde U\bar\psi'.$$

与矩阵 $U'_C$ 在新的表象中的定义比较($(\hat C\psi)' = U'_C\bar\psi'$)，我们有

$$U'_C = UU_C\tilde U. \tag{26.20}$$

只有对于实的 $U$，变换 (26.20) 与矩阵 $\gamma$ 的变换才相同. 因而，只有在那些由旋量表象或标准表象经过实变换而得到的表象中，表达式(26.5)也才是正确的.

矩阵(26.5)是幺正的，转置时改变符号：

$$U_CU_C^{+} = 1, \quad \tilde U_C = -U_C. \tag{26.21}$$

这些性质对变换(26.20) 不变，因而在任何表象中都成立. 矩阵(26.5)也是厄密的($U_C = U_C^{+}$)，但在一般情况下，这一性质被变换(26.20)破坏.

上述讨论[包括公式(26.21)]同样也适用于矩阵 $U_T$ 的性质.

在二次量子化方法中，$\psi$-算符的变换 $C, P, T$ 应该被表述成粒子的产生和湮灭算符的变换规则. 这些规则的建立(类似于§13中对零自旋粒子所做的那样)应该依据这样的要求：被变换的 $\psi$-算

① $\hat C\hat P\hat T$ 的写法是假定算符从右至左依次作用. 由于 $\hat T$ 与 $\hat C$ 和 $\hat P$ 不对易(在它们对双旋量的作用上)，(26.17)和(26.18)中的符号就与这种次序有关.

符能够写成如下形式:

$$\hat{\psi}^C(t,\boldsymbol{r})=U_C\hat{\bar{\psi}}(t,\boldsymbol{r}),$$
$$\hat{\psi}^P(t,\boldsymbol{r})=\mathrm{i}\gamma^0\hat{\psi}(t,-\boldsymbol{r}),\tag{26.22}$$
$$\hat{\psi}^T(t,\boldsymbol{r})=U_T\hat{\bar{\psi}}(-t,\boldsymbol{r}).$$

## 习　　题

求 Majorana 表象中的电荷共轭算符(参看 § 21, 习题 2).

**解**　在 Majorana 表象中, 矩阵 $U'_C$ 可以通过变换 (26.20) 由标准表象中的矩阵 $U_C=-\alpha_y$ 得到, 这时的 $U=(\alpha_y+\beta)/\sqrt{2}$; 求出的 $U'_C=\alpha_y$($\alpha_y$ 和 $\beta$ 都是标准表象的矩阵). 如果 Majorana 表象中的量用带撇表示, 我们有 $\hat{C}\psi'=U'_C(\psi'^*\beta')$; 由于 $\beta'=\alpha_y$, 所以

$$\hat{C}\psi'=\alpha_y(\psi'^*\alpha_y)=\alpha_y\alpha_y\psi'^*=\psi'^*,$$

即电荷共轭和复共轭是等价的.

## § 27. 粒子和反粒子的内禀对称性

自旋为$\frac{1}{2}$的粒子在其静止参考系中的波函数是一个单一的三维旋量(用 $\Phi^\alpha$ 表示). 粒子的内禀宇称概念就与这个旋量在反演时的行为有关. 但是, 如同 § 19 中所述, 虽然三维旋量的两种可能的变换规则($\Phi^\alpha\to\pm\mathrm{i}\Phi^\alpha$) 互不等价, 赋予一个旋量特定的宇称却没有绝对的意义. 因而, 谈论自旋为 1/2 的粒子的内禀宇称是没有意义的, 但是可以讲这种粒子两两之间的相对内禀宇称.

由两个三维旋量 $\Phi^{(1)}$和 $\Phi^{(2)}$可以组成一个标量 $\Phi^{(1)}_\alpha\Phi^{(2)\alpha}$. 如果它是真标量, 就说这两个旋量所描写的粒子具有同一宇称; 如果它是赝标量, 就说这两个粒子具有相反的内禀宇称.

我们来证明, 自旋为 1/2 的粒子和反粒子的内禀宇称是相反的(В. Б. Берестецкий, 1948).

首先,如果将运算 $C$(26.7)用于旋量表象中的 $P$ 变换(19.5)

$$P: \xi^{\alpha}\to i\eta_{\dot{\alpha}},\quad \eta_{\dot{\alpha}}\to i\xi^{\alpha} \tag{27.1}$$

的两边,我们得到

$$\eta^{C\dot{\alpha}*}\to i\xi_{\alpha}^{C*},\qquad \xi_{\alpha}^{C*}\to i\eta^{c\dot{\alpha}*},$$

这里的指标 $c$ 代表与 $\psi=\begin{pmatrix}\xi\\ \eta\end{pmatrix}$ 电荷共轭的双旋量 $\psi^{c}=\begin{pmatrix}\xi^{c}\\ \eta^{c}\end{pmatrix}$的 分量. 取复共轭并交换指标,我们求出

$$P: \eta_{\dot{\alpha}}^{c}\to i\xi^{c\alpha},\quad \xi^{c\alpha}\to i\eta_{\dot{\alpha}}^{c}. \tag{27.2}$$

我们看到,电荷共轭的双旋量在反演时按同一规则变换.

设 $\psi^{(e)}$是粒子(例如,一个电子) 的波函数,而 $\psi^{(p)}$是反粒子(例如,一个正电子)的波函数. 后者是一个与狄拉克方程的"负频率"解电荷共轭的双旋量. 在静止参考系中,它们都变成某种三维旋量:

$$\xi^{(e)\alpha}=\eta_{\dot{\alpha}}^{(e)}=\Phi^{(e)\alpha},\quad \xi^{(p)\alpha}=\eta_{\dot{\alpha}}^{(p)}=\Phi^{(p)\alpha}.$$

根据式(27.1)和(27.2),这两个旋量在反演时的变换规则

$$\Phi^{\alpha}\to i\Phi^{\alpha} \tag{27.3}$$

对 $\Phi^{(e)}$和 $\Phi^{(p)}$是相同的,而乘积 $\Phi^{(e)}\Phi^{(p)}$改变符号,这就证明了上面所做的论断.

真中性粒子是与自己的反粒子完全相同的粒子(§ 12),这种粒子场的 $\psi$ 算符满足条件

$$\hat{\psi}(t,\boldsymbol{r})=\hat{\psi}^{c}(t,\boldsymbol{r}).$$

对于自旋为 1/2 的粒子,这意味着条件(在旋量表象中)①

$$\xi^{\alpha}=-i\eta^{\dot{\alpha}+},\quad \eta_{\dot{\alpha}}\to -i\xi_{\alpha}^{+}. \tag{27.4}$$

和任何一个表达物理性质的关系式一样,这两个条件对 $CPT$ 变换

① 在 Majorana 表象中,真中性只不过意味着算符$\hat{\psi}'$的厄密性(参看§26 习题).

不变①．不难证明，事实上它们不仅对 $CPT$ 变换不变，而且对三种变换中的每一个单独变换也不变．

在 § 19 中我们曾约定把旋量的反演定义为 $p^2=-1$ 的变换，并且一直遵循这个定义．上面所得到的关于粒子和反粒子的相对宇称的结论应该不依赖于反演的定义方式．不难看出，情况确实如此．

如果按条件 $p^2=1$ 定义反演，则式(27.1)将变成

$$P: \xi^{\alpha}\to\eta_{\dot{\alpha}}, \quad \eta_{\dot{\alpha}}\to\xi^{\alpha}. \tag{27.5}$$

这时，电荷共轭函数按照

$$\xi^{c\alpha}\to-\eta^{c}_{\dot{\alpha}}, \quad \eta^{c}_{\dot{\alpha}}\to-\xi^{c\alpha}$$

变换，与式(27.5)相差一个符号．因此，三维旋量 $\Phi$ 将按照

$$\Phi^{(e)\alpha}\to\Phi^{(e)\alpha}, \Phi^{(p)\alpha}\to-\Phi^{(p)\alpha}$$

变换，因而乘积 $\Phi^{(e)}\Phi^{(p)}$ 将仍然是赝标量．

两种反演概念在物理结果上的唯一可能的差别是：根据式(27.5)，真中性场的条件对这种变换(或 $CP$ 变换)不是不变的，而是要改变等式(27.4)两边的相对符号．实际上，已知的真中性粒子中没有自旋为 1/2 的，现在还不能说两种反演定义的上述差别有没有实际的物理意义②．

## 习　题

求电子偶素(由电子和正电子组成的类氢系统)的电荷宇称。

**解**　两个费米子的波函数对同时交换两粒子的坐标、自旋和电荷变量应该是反对称的(比较 § 13 的习题)．交换坐标要给波函数乘以 $(-1)^l$，交换自旋乘以 $(-1)^{1+S}$(这里 $S=0$ 或 1，是系统的总自旋)，交换电荷再乘以待求

---

① 更确切地说，$CPT$ 变换的定义在这里应该使类型(27.4)的关系式保持不变，适当选择矩阵 $U_T$ 定义中的相因子就能做到这一点(参看 § 26 第三个脚注)．

② 两种反演定义的不完全等价性是由 Racah 首先指出的 (G. Racah, 1937)．

的 $C$. 由条件 $(-1)^l(-1)^{l+s}C=-1$, 我们求出

$$C=(-1)^{l+s}.$$

由于电子和正电子的内禀宇称相反, 所以系统的空间宇称 $P=(-1)^{l+1}$, 组合宇称: $CP=(-1)^{s+1}$.

## § 28. 双线性式

我们来研究由函数 $\psi$ 和 $\psi^*$ 的分量组成的各种双线性式的变换性质. 这类双线性式在量子力学中是非常重要的. 四维流密度矢量(21.11)就属于这类双线性式.

因为 $\psi$ 和 $\psi^*$ 各有四个分量, 由它们可以组成 $4\times4=16$ 个独立的双线性组合. 根据 § 19 中任意两个双旋量(在这里就是 $\psi$ 和 $\psi^*$)的相乘方式, 这 16 个组合式按其变换性质的分类是显而易见的, 即: 可以组成标量(用 $S$ 表示), 赝标量($P$), 与真四维矢量 $V^\mu$ (4 个独立量)等价的二秩混合旋量, 与赝四维矢量 $A^\mu$(4 个量)等价的二秩混合旋量, 与反对称四维张量 $T^{\mu\nu}$(6 个量) 等价的二秩双旋量.

写成对称形式(在 $\psi$ 的任何表象中), 这些组合可以写成

$$S=\bar{\psi}\psi,\quad P=\mathrm{i}\bar{\psi}\gamma^5\psi,$$

$$V^\mu=\bar{\psi}\gamma^\mu\psi,\quad A^\mu=\bar{\psi}\gamma^\mu\gamma^5\psi,\quad T^{\mu\nu}=\mathrm{i}\bar{\psi}\sigma^{\mu\nu}\psi, \tag{28.1}$$

式中

$$\sigma^{\mu\nu}=\frac{1}{2}(\gamma^\mu\gamma^\nu-\gamma^\nu\gamma^\mu)=(\boldsymbol{\alpha},\mathrm{i}\boldsymbol{\Sigma}) \tag{28.2}$$

[式 (28.2) 中的分量如式 (19.15) 所列]①. 以上表达式全部是实的.

由于量 $S$ 和 $P$ 在旋量表象中为

---

① 对 $\psi$ 进行么正变换时(改变表象), 我们有:

$$\psi\to U\psi,\ \gamma\to U\gamma U^{-1},\quad \bar{\psi}\to\bar{\psi}U^{-1},$$

显然, 双线性式对这种变换是不变的.

$$S=\xi^*\eta+\eta^*\xi,\quad P=\mathrm{i}(\xi^*\eta-\eta^*\xi)$$

恰好与表达式(19.7)和(19.8)一致，显然，$S$ 是标量，$P$是赝标量.

狄拉克方程 $p_\mu\gamma^\mu\psi=m\psi$ 左乘以 $\bar{\psi}$，我们得到

$$\bar{\psi}p_\mu\gamma^\mu\psi=m\bar{\psi}\psi,$$

由于右边是标量，所以左边的表达式也应该是标量. 由此可知，量 $V^\mu$ 是矢量.

式(28.1)各量的组成规则显而易见：矩阵 $\gamma^\mu$ 犹如四维矢量，$\gamma^5$ 是赝标量，而两边的 $\bar{\psi}$ 和 $\psi$ 在一起形成标量[①]. 双线性式中不会有对称四维张量，这一点从旋量表示可以看出，也可由下述规则看出：由于矩阵的对称组合是 $\gamma^\mu\gamma^\nu+\gamma^\nu\gamma^\mu=2g^{\mu\nu}$，而任何这种形式总化为一个标量.

将式(28.1)中的 $\psi$-函数换成 $\psi$-算符，就得到二次量子化的双线性式. 为了具有更大的普遍性，我们将认为两个 $\psi$-算符属于不同粒子的场，并用指标 $a$ 和 $b$ 区分它们. 现在让我们来看这样的算符式在电荷共轭时如何变换. 注意到[②]

$$\hat{\psi}^C=U_C\hat{\bar{\psi}},\qquad \hat{\bar{\psi}}^C=U_C^+\hat{\psi}\tag{28.3}$$

利用式(26.3)和(26.21)，我们有

$$\hat{\bar{\psi}}{}_a^C\hat{\psi}_b^C=\hat{\psi}_aU_C^*U_C\hat{\bar{\psi}}_b=-\hat{\psi}_aU_C^+U_C\hat{\bar{\psi}}_b=-\hat{\psi}_a\hat{\bar{\psi}}_b,$$

$$\hat{\bar{\psi}}{}_a^C\gamma^\mu\hat{\psi}_b^C=\hat{\psi}_aU_C^*\gamma^\mu U_C\hat{\bar{\psi}}_b=-\hat{\psi}_aU_C^+\gamma^\mu U_C\hat{\bar{\psi}}_b=\hat{\psi}_a\tilde{\gamma}^\mu\hat{\bar{\psi}}_b.$$

当算符按原来次序排列时($\hat{\bar{\psi}}$ 在 $\hat{\psi}$ 左边)，由于费米对易法则(25.4)，乘积改变符号(此外，出现与场的状态无关的一些项；我们

---

① 由于 $\gamma^5=\frac{\mathrm{i}}{24}e_{\lambda\mu\nu\rho}\gamma^\lambda\gamma^\mu\gamma^\nu\gamma^\rho$，$\gamma^5$ 本身的"赝标量性"和这些规则相一致.

② 为了从第一等式得到第二式，可写为

$$\hat{\bar{\psi}}{}^c=[U_c^*(\hat{\bar{\psi}}\gamma^{0*})]\gamma^0=\tilde{\gamma}^0U_c^*\gamma^0\hat{\psi}=-\tilde{\gamma}^0U_c^+\gamma^0\hat{\psi}=\tilde{\gamma}^0\gamma^{0*}U_c^+\hat{\psi}=U_c^+\hat{\psi}$$

[利用了式(26.3)，(26.21)和 $\gamma^0$ 的厄密性].

略去了这些项，和在 § 13 中类似的处理一样）．因此，我们得到

$$\hat{\bar{\psi}}_a^C \hat{\psi}_b^C = \hat{\bar{\psi}}_b \hat{\psi}_a, \quad \hat{\bar{\psi}}_a^C \gamma^\mu \hat{\psi}_b^C = -\hat{\bar{\psi}}_b \gamma^\mu \hat{\psi}_a.$$

对其它双线性式作类似处理，我们求得，在电荷共轭时有①

$$C: \quad \hat{S}_{ab} \to \hat{S}_{ba}, \quad \hat{P}_{ab} \to \hat{P}_{ba}, \quad \hat{V}^\mu_{ab} \to -\hat{V}^\mu_{ba}$$
$$\hat{A}^\mu_{ab} \to \hat{A}^\mu_{ba}, \quad \hat{T}^{\mu\nu}_{ab} \to -\hat{T}^{\mu\nu}_{ba} \tag{28.4}$$

用类似的方法可以确定这些双线性式在时间反演时的行为．这时必须记住（参看 § 13），这种运算要引起算符次序的改变．例如

$$(\hat{\bar{\psi}}_a \hat{\psi}_b)^T = \hat{\psi}_b^T \hat{\bar{\psi}}_a^T.$$

在此式中代入

$$\hat{\psi}^T = U_T \hat{\bar{\psi}}, \quad \hat{\bar{\psi}}^T = -U_T^+ \hat{\psi}, \tag{28.5}$$

我们得到

$$(\hat{\bar{\psi}}_a \hat{\psi}_b)^T = -\hat{\bar{\psi}}_b \tilde{U}_T U_T^+ \hat{\psi}_a = \hat{\bar{\psi}}_b U_T U_T^+ \psi_a = \hat{\bar{\psi}}_b \hat{\psi}_a.$$

用同样的方法研究其余的双线性式，我们得到

$$T: \quad \hat{S}_{ab} \to \hat{S}_{ba}, \quad \hat{P}_{ab} \to -\hat{P}_{ba}, \quad (\hat{V}^0, \hat{\mathbf{V}})_{ab} \to (\hat{V}^0, -\hat{\mathbf{V}})_{ba},$$
$$(\hat{A}^0, \hat{\mathbf{A}})_{ab} \to (\hat{A}^0, -\hat{\mathbf{A}})_{ba}, \quad \hat{T}^{\mu\nu}_{ab} = (\hat{\mathbf{p}}, \hat{\mathbf{a}})_{ab} \to (\hat{\mathbf{p}}, -\hat{\mathbf{a}})_{ba} \tag{28.6}$$

[$\hat{\mathbf{p}}, \hat{\mathbf{a}}$ 是三维矢量，按照式(19.15)，等价于 $\hat{T}^{\mu\nu}$ 的分量]．

在空间反演时，根据张量的性质，我们有②

$$P: \hat{S}_{ab} \to \hat{S}_{ab}, \quad \hat{P}_{ab} \to -\hat{P}_{ab}, \quad (\hat{V}^0, \hat{\mathbf{V}})_{ab} \to (\hat{V}^0, -\hat{\mathbf{V}})_{ab},$$
$$(\hat{A}^0, \hat{\mathbf{A}})_{ab} \to (-\hat{A}^0, \hat{\mathbf{A}})_{ab}, \quad \hat{T}^{\mu\nu}_{ab} = (\hat{\mathbf{p}}, \hat{\mathbf{a}})_{ab} \to (-\hat{\mathbf{p}}, \hat{\mathbf{a}})_{ab}. \tag{28.7}$$

---

① 应该注意，对于由 $\psi$-函数（而不是 $\psi$-算符）组成的双线性式，变换(28.4)具有相反的符号，因为函数因子 $\bar{\psi}$ 和 $\psi$ 回到原来次序时不会伴随符号的改变．

② 为避免误解，请注意这样一点：变换 $T$ 和 $P$ 同样要求改变函数的自变量；若式(28.6)和(28.7)的左边是函数 $x=(t,\mathbf{r})$，其右边（被变换了的双线性式）分别是函数

$$x^T = (-t, \mathbf{r}), \qquad x^P = (t, -\mathbf{r}).$$

最后，联合应用三种运算，所有的 $\hat{S}_{ab}$, $\hat{P}_{ab}$, $\hat{T}^{\mu\nu}_{ab}$ 保持不变，而所有的 $\hat{V}^{\mu}_{ab}$, $\hat{A}^{\mu}_{ab}$ 改变符号. 这恰好与这种变换就是四维反演一致：由于四维反演等价于四维坐标系的转动，所以任何秩真张量和赝张量对这种转动没有区别.

现在我们来考虑由四个不同函数 $\psi^a$, $\psi^b$, $\psi^c$, $\psi^d$ 组成的双线性式的成对乘积. 不同的成对函数相乘，得到不同的结果. 但是，有可能把任何这种乘积都化为具有确定因子对的双线性式的乘积 (W. Pauli, M. Fierz, 1936). 我们来推导进行这种约化的关系式.

我们先研究四阶矩阵的集合

$$1, \gamma^5, \gamma^\mu, i\gamma^\mu\gamma^5, i\sigma^{\mu\nu} \tag{28.8}$$

(1 为单位矩阵). 给这 16 个(1+1+4+4+6)矩阵按任意确定的序列编号，并用 $\gamma^A$ ($A=1,\cdots,16$) 表示它们. 而把四维张量指标 ($\mu\nu$) 在下边的同样矩阵用 $\gamma_A$ 表示. 它们具有下列性质：

$$\mathrm{Sp}\gamma^A=0 \quad (\gamma^A\neq 1),$$

$$\gamma^A\gamma_A=1, \frac{1}{4}\mathrm{Sp}\gamma^A\gamma_B=\delta^A_B. \tag{28.9}$$

最后一条性质说明，矩阵 $\gamma^A$ 是线性无关的. 又因为它们的数目等于四阶矩阵的元素数目 ($4\times 4$)，所以，矩阵 $\gamma^A$ 组成一个可以表达任意四阶矩阵 $\Gamma$ 的完全集：

$$\Gamma=\sum_A c_A\gamma^A, \quad c_A=\frac{1}{4}\mathrm{SP}\gamma_A\Gamma, \tag{28.10}$$

或者写成矩阵指标 ($i, k=1, 2, 3, 4$) 的明显形式

$$\Gamma_{ik}=\frac{1}{4}\sum_A\Gamma_{lm}\gamma^A_{ml}\gamma_{Aik}.$$

特别是，如果矩阵 $\Gamma$ 只包含一个非零元素 ($\Gamma_{lm}$)，就得到所求的关系式 (“完全性条件”).

$$\delta_{il}\delta_{km}=\frac{1}{4}\sum_A \gamma_{Aik}\gamma^A_{ml}. \tag{28.11}$$

此式两边乘以 $\bar{\psi}^a_i\psi^b_k\bar{\psi}^c_m\psi^d_l$，我们得到

$$(\bar{\psi}^a\psi^d)(\bar{\psi}^c\psi^b)=\frac{1}{4}\sum_A(\bar{\psi}^a\gamma_A\psi^b)(\bar{\psi}^c\gamma^A\psi^d). \tag{28.12}$$

这个方程把两个标量双线性式之积化为由别的因子对组成的双线性式的乘积①．这是我们要推导的等式之一．

这个类型的其它等式可以根据式(28.12)得到，为此，需要进行代换

$$\psi^d\to\gamma^B\psi^d,\quad \psi^b\to\gamma^C\psi^b$$

并利用展开式

$$\gamma^A\gamma^B=\sum_R c_R\gamma^R,\qquad c_R=\frac{1}{4}\mathrm{Sp}\,\gamma^A\gamma^B\gamma_R$$

(参看习题)．

为了后面引用方便，这里我们还要给出与式(28.11)对应的二阶矩阵的关系式．线性独立的二阶矩阵 $\sigma^A(A=1,\cdots,4)$ 的完全集是

$$1,\ \sigma_x,\sigma_y,\sigma_z. \tag{28.13}$$

它们具有性质

$$\mathrm{Sp}\,\sigma^A=0\quad(\sigma^A\neq1),$$

$$\frac{1}{2}\mathrm{Sp}\,\sigma^A\sigma^B=\delta_{AB}. \tag{28.14}$$

其完全性条件是：

$$\delta_{\alpha\gamma}\delta_{\beta\delta}=\frac{1}{2}\sum_A\sigma^A_{\alpha\beta}\sigma^A_{\delta\gamma}=\frac{1}{2}\boldsymbol{\sigma}_{\alpha\beta}\cdot\boldsymbol{\sigma}_{\delta\gamma}+\frac{1}{2}\delta_{\alpha\beta}\delta_{\delta\gamma} \tag{28.15}$$

---

① 为了避免误解，应该说明，这里指的是由 $\psi$-函数组成的双线性式．对于由反对易 $\psi$-算符组成的双线性式，变换的符号是相反的．

$(\alpha, \beta, \cdots = 1, 2)$或者按另一种方式写成：

$$\boldsymbol{\sigma}_{\alpha\beta}\cdot\boldsymbol{\sigma}_{\delta\gamma} = -\frac{1}{2}\boldsymbol{\sigma}_{\alpha\gamma}\cdot\boldsymbol{\sigma}_{\delta\beta} + \frac{3}{2}\delta_{\alpha\gamma}\delta_{\delta\beta}. \qquad (28.16)$$

## 习　　题

对双线性式 $P, V, A, T$ 的两对标量积导出与式(28.12)类似的公式.

**解**　我们引用符号

$$J_S = (\bar{\psi}^a\psi^b)(\bar{\psi}^c\psi^d), \qquad J_P = (\bar{\psi}^a\gamma^5\psi^b)(\bar{\psi}^c\gamma^5\psi^d),$$

$$J_V = (\bar{\psi}^a\gamma^\mu\psi^b)(\bar{\psi}^c\gamma_\mu\psi^d), \qquad J_A = (\bar{\psi}^a \mathrm{i}\gamma^\mu\gamma^5\psi^b)(\bar{\psi}^c \mathrm{i}\gamma_\mu\gamma^5\psi^d),$$

$$J_T = (\bar{\psi}^a \mathrm{i}\sigma^{\mu\nu}\psi^b)(\bar{\psi}^c \mathrm{i}\sigma_{\mu\nu}\psi^d),$$

而用带撇的字母表示交换了 $\psi^b$ 和 $\psi^d$ 位置的同样的乘积. 按照正文中所指出的方法，我们得到

$$\begin{aligned}
4J'_S &= J_S + J_V + J_T + J_A + J_P,\\
4J'_V &= 4J_S - 2J_V \quad + 2J_A - 4J_P,\\
4J'_T &= 6J_S \qquad\qquad - 2J_T + 6J_P,\\
4J'_A &= 4J_S + 2J_V \quad - 2J_A - 4J_P.\\
4J'_P &= J_S - J_V + J_T - J_A + J_P
\end{aligned}$$

[第一个等式与式(28.12)相同].

## §29. 极化密度矩阵

描述动量为 $\boldsymbol{p}$ 的自由运动(平面波)的波函数 $\psi$，其坐标相关性归结为公因子 $e^{i\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{r}}$，而振幅 $u_p$ 起着自旋波函数的作用. 在这样的状态(纯态)中，粒子是完全极化的(参看第三卷，§59). 在非相对论性理论中，这意味着粒子的自旋具有确定的空间方向(更确切地说，存在着自旋分量为 $+1/2$ 确定值的方向). 在相对论性理论中，§23 指出，由于自旋矢量不守恒，在任意参考系中这样描述一个状态已不可能. 纯态仅仅意味着在粒子静止的参考系中，自旋才具有确定的方向.

在一个部分极化的状态中，不存在确定的振幅，而只有极化密

度矩阵 $\rho_{ik}(i,k=1,2,3,4$ 为双旋量指标). 这个矩阵的定义，应该使它在纯态中化为乘积

$$\rho_{ik}=u_{pi}\bar{u}_{pk}. \tag{29.1}$$

因此,矩阵 $\rho$ 的归一化条件是

$$\mathrm{Sp}\rho=2m \tag{29.2}$$

[参看(23.4)].

在纯态中,自旋平均值由量

$$\bar{\mathbf{s}}=\frac{1}{2}\int\psi^*\boldsymbol{\Sigma}\psi\mathrm{d}^3x=\frac{1}{4\varepsilon}u_p^*\boldsymbol{\Sigma}u_p=\frac{1}{4\varepsilon}\bar{u}_p\gamma^0\boldsymbol{\Sigma}u_p \tag{29.3}$$

确定. 对于部分极化状态,相应的表达式是

$$\bar{\mathbf{s}}=\frac{1}{4\varepsilon}\mathrm{Sp}(\rho\gamma^0\boldsymbol{\Sigma})=\frac{1}{4\varepsilon}\mathrm{Sp}(\rho\gamma^5\boldsymbol{\gamma}). \tag{29.4}$$

振幅 $u_p,\bar{u}_p$ 满足代数方程组

$$(\gamma p-m)u_p=0,\qquad \bar{u}_p(\gamma p-m)=0.$$

所以矩阵(29.1)满足方程

$$(\gamma p-m)\rho=\rho(\gamma p-m)=0. \tag{29.5}$$

在混合态(对自旋来说)的一般情况下，密度矩阵应该满足同样的线性方程(比较第三卷 §14 中类似的结论).

如果对自由粒子在其静止参考系中进行研究，可以运用非相对论性理论。在这个理论中，部分极化态由三个参数——平均自旋矢量 $\bar{\mathbf{s}}$ 的三个分量完全决定. 显然，同样的几个参数将决定经过任一洛伦兹变换后的极化态,即运动粒子的极化态.

让我们用 $\boldsymbol{\zeta}$ 表示静止参考系中的二倍平均自旋矢量 (在纯态中,$|\boldsymbol{\zeta}|=1$,在混合态中，$|\boldsymbol{\zeta}|<1$). 为了对极化态进行四维描述，引入四维矢量 $a^\mu$ 比较方便,在静止参考系中它就是三维矢量 $\boldsymbol{\zeta}$. 由于 $\boldsymbol{\zeta}$ 是轴矢量,所以 $a^\mu$ 是四维赝矢量. 这个四维矢量与静止参考系中的四维动量正交[在静止参考系中，$a^\mu=(0,\boldsymbol{\zeta})$，$p^\mu=(m,0)$],

因此，在任意参考系中，

$$a^{\mu} p_{\mu}=0. \tag{29.6}$$

此外，在任意参考系中将有

$$a_{\mu} a^{\mu}=-\zeta^{2}. \tag{29.7}$$

在粒子以速度$\boldsymbol{v}=\boldsymbol{p}/\varepsilon$运动的参考系中，四维矢量$a^{\mu}$的分量可以利用洛伦兹变换由静止参考系求出：

$$a^{0}=\frac{|\boldsymbol{p}|}{m}\zeta_{\parallel}, \boldsymbol{a}_{\perp}=\boldsymbol{\zeta}_{\perp}, \quad a_{\parallel}=\frac{\varepsilon}{m}\zeta_{\parallel}, \tag{29.8}$$

式中的指标 // 和⊥分别表示与方向$\boldsymbol{p}$平行和垂直的分量①. 这几个公式可以写成矢量形式：

$$\boldsymbol{a}=\boldsymbol{\zeta}+\frac{\boldsymbol{p}(\boldsymbol{\zeta} \boldsymbol{p})}{m(\varepsilon+m)}, \quad a^{0}=\frac{\boldsymbol{a} \cdot \boldsymbol{p}}{\varepsilon}=\frac{\boldsymbol{p} \cdot \boldsymbol{\zeta}}{m}, \quad \boldsymbol{a}^{2}=\boldsymbol{\zeta}^{2}+\frac{(\boldsymbol{p} \cdot \boldsymbol{\zeta})^{2}}{m^{2}}. \tag{29.9}$$

我们首先研究非极化态($\zeta=0$). 在这种情况下，密度矩阵中只有四维动量$p$作为参数出现. 这种矩阵满足方程(29.5)的唯一形式是

$$\rho=\frac{1}{2}(\gamma p+m) \tag{29.10}$$

(И. Е. Тамм, 1930, H. B. G. Casimir, 1933). 常系数是根据归一化条件(29.2)选择的。

在部分极化的一般情况下($\zeta \neq 0$)，我们来求形如

$$\rho=\frac{1}{4 m}(\gamma p+m) \rho^{\prime}(\gamma p+m) \tag{29.11}$$

---

① 在相对论力学中，和任何角动量的分量一样，平均自旋矢量$\bar{\boldsymbol{s}}$的分量就其变换性质而言，是反对称张量$S^{\lambda\mu}$的空间分量. 四维矢量$a^{\lambda}$与这个张量的关系是：

$$S^{\lambda \mu}=\frac{1}{2 m} e^{\lambda \mu \nu \rho} a_{\nu} p_{\rho}, \quad a^{\lambda}=-\frac{2}{m} e^{\lambda \mu \nu \rho} S_{\mu \nu} p_{\rho}.$$

我们着重指出，在任意参考系中，四维矢量$a^{\lambda}$的空间部分$\boldsymbol{a}$绝不等于$2\bar{\boldsymbol{s}}$. 不难看出，

$$2 \bar{s}_{\parallel}=\frac{1}{m}\left(a_{\parallel} \varepsilon-a^{0}|\boldsymbol{p}|\right)=\zeta_{\parallel}, \quad 2 \bar{\boldsymbol{s}}_{\perp}=\frac{\varepsilon}{m} \boldsymbol{a}_{\perp}=\frac{\varepsilon}{m} \boldsymbol{\zeta}_{\perp}.$$

的密度矩阵，它自动地满足方程(29.5)．当 $\zeta=0$ 时，辅助矩阵 $\rho'$ 必须是单位矩阵；由于

$$(\gamma p+m)^2=2m(\gamma p+m),$$

所以，表达式(29.11)与(29.10)是一样的．其次，矩阵 $\rho'$ 应该包含四维矢量 $a$ 的一次项作为参数，即具有如下形式

$$\rho'=1-A\gamma^5(\gamma a); \tag{29.12}$$

在第二项中出现赝矢量 $a$ 和"四维矩阵赝矢量"$\gamma^5\boldsymbol{\gamma}$ 的标量积．为了确定系数 $A$，我们写出静止参考系中的密度矩阵：

$$\rho=\frac{m}{4}(1+\gamma^0)(1+A\gamma^5\boldsymbol{\gamma}\cdot\boldsymbol{\zeta})(1+\gamma^0)$$

$$=\frac{m}{2}(1+\gamma^0)(1+A\gamma^5\boldsymbol{\gamma}\cdot\boldsymbol{\zeta}),$$

并按照式(29.4)计算自旋平均值．利用§22中的法则不难发现，迹中的唯一非零项是

$$2\overline{\mathbf{s}}=\frac{1}{2m}\mathrm{Sp}(\rho\gamma^5\boldsymbol{\gamma})=-\frac{A}{4}\mathrm{Sp}((\boldsymbol{\gamma}\cdot\boldsymbol{\zeta})\boldsymbol{\gamma})=A\boldsymbol{\zeta}.$$

令这个表达式等于 $\boldsymbol{\zeta}$，我们得到 $A=1$．把式(29.12)代入(29.11)并交换因子 $\rho'$和$(\gamma p+m)$，就得到 $\rho$ 的最后表达式．由于 $a$ 和 $p$ 正交，乘积 $\gamma p$ 与 $\gamma a$ 反对易：

$$(\gamma a)(\gamma p)=2ap-(\gamma p)(\gamma a)=-(\gamma p)(\gamma a),$$

因而与 $\gamma^5(\gamma a)$ 对易．

这样，部分极化电子的密度矩阵可表达为

$$\rho=\frac{1}{2}(\gamma p+m)[1-\gamma^5(\gamma a)] \tag{29.13}$$

(L. Michel, A. S. Wightman, 1955)．如果矩阵 $\rho$ 已知，则表征状态的四维矢量 $a$ 可以按下面公式求出：

$$a^\mu=\frac{1}{2m}\mathrm{Sp}(\rho\gamma^5\gamma^\mu). \tag{29.14}$$

正电子的与电子的密度矩阵公式完全类似．如果一个具有四

维动量 $p$ 的正电子用它的振幅 $u_p^{正电}$和根据这个振幅定义的密度矩阵 $\rho^{正电}$来描述，则与电子的情形没有任何区别，且矩阵 $\rho^{正电}$ 将由同一公式(29.13)给出．但是，在实际计算有正电子参加的散射过程的截面时（下面将会看到），我们所遇到的不是 $u_p^{正电}$，而是"负频率"的振幅 $u_{-p}$．所以，极化密度矩阵（用$\rho^{(-)}$表示）的定义应该能使它在纯态时化为 $u_{-pi}\bar{u}_{-pk}$.

按照式(26.1)，正电子的振幅 $u_p^{正电}=U_C\bar{u}_{-p}$．相反地，

$$u_{-p}=U_C\bar{u}_p^{正电},\bar{u}_{-p}=U_C^+u_p^{正电}=u_p^{正电}U_C^*$$

[比较式(28.3)]．如果

$$\rho_{ik}^{(-)}=u_{-pi}\bar{u}_{-pk},\quad \rho_{ik}^{正电}=u_{pi}^{正电}\bar{u}_{pk}^{正电},$$

则这些公式给出

$$\rho^{(-)}=U_C\tilde{\rho}^{正电}U_C^*. \tag{29.15}$$

代入 $\rho^{正电}$的表达式(29.13)并利用式(26.3)，(26.21)进行简单的整理，我们得到

$$\rho^{(-)}=\frac{1}{2}(\gamma p-m)[1-\gamma^5(\gamma a)] \tag{29.16}$$

特别是，对于非极化态，

$$\rho^{(-)}=\frac{1}{2}(\gamma p-m). \tag{29.17}$$

后面在谈到正电子密度矩阵时，我们将指的是矩阵 $\rho^{(-)}$并略去指标(—)（矩阵 $\rho^{正电}$实际上并不用）．

在各种计算中，我们常常需要求形如 $\bar{u}Fu(\equiv\bar{u}_iF_{ik}u_k)$的表达式对自旋态的平均值，这里 $F$ 是某种（四阶）矩阵，而 $u$ 是具有确定四维动量 $p$ 的状态的双旋量振幅．这种求平均等价于用部分极化态的密度矩阵 $\rho_{ki}$ 代替乘积 $u_k\bar{u}_i$.

特别是，对两个独立自旋态的完全平均等价于换成非极化态，按照式(29.10)，这时我们有

$$\frac{1}{2}\sum_{\text{极化}}\bar{u}_p F u_p=\frac{1}{2}\mathrm{Sp}(\gamma p+m)F. \tag{29.18}$$

对于负频率的波函数，类似地有

$$\frac{1}{2}\sum_{\text{极化}}\bar{u}_{-p} F u_{-p}=\frac{1}{2}\mathrm{Sp}(\gamma p-m)F. \tag{29.19}$$

如果这里指的不是求平均，而是按自旋态求和，其结果将大一倍.

现在我们来考察密度矩阵(29.13)怎样过渡到非相对论极限下的表达式. 为此，我们回到电子的静止参考系. 在波函数的标准表象中，此参考系内的振幅 $u_p$ 在非相对论极限下具有两个分量，因此，密度矩阵应该变成二阶. 实际上，在静止参考系中，

$$\rho=\frac{m}{2}(\gamma^0+1)(1+\gamma^5\boldsymbol{\gamma}\cdot\boldsymbol{\zeta}),$$

利用矩阵 $\gamma$ 的表达式(21.20)和(22.18)，我们求出

$$\rho=\begin{pmatrix}\rho_{\text{非相}} & 0\\ 0 & 0\end{pmatrix},\qquad \rho_{\text{非相}}=m(1+\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{\zeta}) \tag{29.20}$$

零代表二阶零矩阵. 如果采用非相对论理论中一般的归一化，密度矩阵归一化为 1($\mathrm{Sp}\rho_{\text{非相}}=1$)而不是 $2m$，则上式必须除以 $2m$，因而得到

$$\frac{1}{2}(1+\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{\zeta}),$$

这与第三卷式(59.6)相一致.

类似地，正电子密度矩阵的非相对论极限是

$$\rho=\begin{pmatrix}0 & 0\\ 0 & \rho_{\text{非相}}\end{pmatrix}\quad \rho_{\text{非相}}=-m(1+\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{\zeta}).$$

最后，我们写出极端相对论情况下密度矩阵的简化表达式. 设在式(29.8)中取 $|\boldsymbol{p}|\approx\varepsilon$[从而忽略相对小量 $(m/\varepsilon)^2$]，并将结果代入式(29.13)或(29.16)，选 $\boldsymbol{p}$ 方向作为 $x$ 轴，可以写出：

$$\rho=\frac{1}{2}[\varepsilon(\gamma^0-\gamma^1)\pm m]\left[1-\gamma^5\left(\frac{\varepsilon}{m}(\gamma^0-\gamma^1)\zeta_{\parallel}-\zeta_{\perp}\cdot\gamma_{\perp}\right)\right],$$

式中第一个方括号内 $m$ 前的符号，电子取"+"，正电子取"−"．当乘积展开时，其中的首项消去，次级项给出

$$\rho=\frac{1}{2}\varepsilon(\gamma^0-\gamma^1)[1+\gamma^5(\pm\zeta_{\parallel}+\zeta_{\perp}\cdot\gamma_{\perp})]$$

或者重新将 $\varepsilon(\gamma^0-\gamma^1)$ 写成 $\gamma p$ 的形式：

$$\rho=\frac{1}{2}(\gamma p)[1+\gamma^5(\pm\zeta_{\parallel}+\boldsymbol{\zeta}_{\perp}\cdot\boldsymbol{\gamma}_{\perp})]. \tag{29.21}$$

这就是所求的极端相对论情形下的密度矩阵的表达式．我们注意到，极化矢量 $\zeta$ 的两个分量以相同的数量级平等地包含在这个表达式中．我们还记得，$\zeta_{\parallel}$ 是极化矢量与粒子的动量相平行($\zeta_{\parallel}>0$)或反平行($\zeta_{\parallel}<0$)的分量．特别是对此粒子的螺旋性状态，$\zeta_{\parallel}=2\lambda=\pm1$；这时，密度矩阵具有特别简单的形式：

$$\rho=\frac{1}{2}(\gamma p)(1\pm2\lambda\gamma^5), \tag{29.22}$$

它应该与中微子或反中微子的密度矩阵的形式相合，这是因为，中微子或反中微子是质量为零且有确定的螺旋性的粒子（参看下面 § 30）．

## § 30. 二分量费米子

我们在 § 20 中看到，描述自旋为 1/2 的粒子要用两个旋量($\xi$ 和 $\eta$)，这是与粒子的质量相联系的．如果粒子的质量为零，这种必要性就没有了．描述这种粒子的波动方程只需要一个旋量，比如说，用带点旋量 $\eta$：

$$\hat{p}^{\alpha\dot{\beta}}\eta_{\dot{\beta}}=0, \tag{30.1}$$

或者等效地，

$$(\hat{p}_0+\hat{\boldsymbol{p}}\cdot\boldsymbol{\sigma})\eta=0. \tag{30.2}$$

在§20中还看到，包含质量$m$的波动方程对反演［变换(20.4)］必定对称．当用一个旋量描述粒子时，这种对称性就不复存在．好在反演对称性并不是自然界的普遍性质．

对$m$为零的粒子，其能量和动量之间存在着关系式$\varepsilon=|\boldsymbol{p}|$，所以，对于平面波($\eta_p\sim e^{-ipx}$)，方程(30.2)给出

$$(\boldsymbol{n}\cdot\boldsymbol{\sigma})\eta_p=-\eta_p, \tag{30.3}$$

式中$\boldsymbol{n}$是矢量$\boldsymbol{p}$方向的单位矢量．同样的方程

$$(\boldsymbol{n}\cdot\boldsymbol{\sigma})\eta_{-p}=-\eta_{-p} \tag{30.4}$$

对“负频率”的波($\eta_{-p}\backsim e^{ipx}$)也成立．

二次量子化$\psi$-算符为：

$$\hat{\eta}=\sum_p(\eta_p\hat{a}_p+\eta_{-p}\hat{b}_p^+),\hat{\eta}^+=\sum_p(\eta_p^*\hat{a}_p^++\eta_{-p}^*\hat{b}_p). \tag{30.5}$$

通常由此得出，$\eta_{-p}^*$为反粒子的波函数．

根据算符$\hat{p}^{\alpha\dot{\beta}}$的定义(20.1)可以看出，$\hat{p}^{\alpha\dot{\beta}*}=-\hat{p}^{\dot{\alpha}\beta}$．因而复共轭旋量$\eta^*$满足方程$\hat{p}^{\dot{\alpha}\beta}\overset{*}{\eta}_{\dot{\beta}}=0$，或者等价地有

$$\hat{p}_{\dot{\alpha}\beta}\eta^{\dot{\beta}*}=0.$$

写成$\eta^{\dot{\beta}*}=\xi^\beta$，就表达了这样的事实：复共轭将带点旋量变成不带点旋量．这样，反粒子的波函数满足方程

$$\hat{p}_{\dot{\alpha}\beta}\xi^\beta=0, \tag{30.6}$$

或者

$$(\hat{p}_0-\hat{\boldsymbol{p}}\cdot\boldsymbol{\sigma})\xi=0. \tag{30.7}$$

因此，对于平面波，

$$(\boldsymbol{n}\cdot\boldsymbol{\sigma})\xi_p=\xi_p. \tag{30.8}$$

但是，$\frac{1}{2}\boldsymbol{n}\cdot\boldsymbol{\sigma}$是自旋在运动方向上的投影算符，所以方程

(30.3)和(30.8)意味着，具有一定动量的粒子的状态必然是螺旋性状态，自旋在运动方向上的分量具有确定值．这时，如果粒子的自旋与动量反方向(螺旋性为$-1/2$)，则反粒子的自旋沿着动量方向(螺旋性为$+1/2$)．

存在于自然界的**中微子**可能就是具有这种性质的粒子．习惯上把螺旋性为 $-1/2$ 的粒子有条件地称为中微子，而螺旋性为 $+1/2$ 的粒子叫反中微子①．

中微子状态在自旋方向上是非简并的，与此相关，我们在§8中说过，一个质量为零的粒子只具有对动量方向的轴对称性．对一个真中性粒子——光子，这种对称性既包括绕此轴的转动对称，又包括在穿过此轴的平面内的反射对称．在中微子的情况下，不存在反射对称，只有绕轴的转动群保持角动量沿该轴的分量守恒，且不改变符号．只有同时将粒子变为反粒子，才会有反射对称性．

还必须指出，中微子必然是纵向极化，这意味着无法把它的自旋和轨道角动量区别开来（如同光子必然是横向极化的一样，参看§6)．

由一个旋量 $\eta$(或 $\xi$) 共可构成四个双线性组合，它们一起组成四维矢量

$$j^{\mu}=(\eta^{*}\eta,\eta^{*}\sigma\eta). \tag{30.9}$$

不难证明，方程

$$(\hat{p}_0+\hat{\mathbf{p}}\cdot\sigma)\eta=0,\eta^{*}(\hat{p}_0-\hat{\mathbf{p}}\cdot\sigma)=0$$

意味着连续性方程 $\partial_{\mu}j^{\mu}=0$ 成立，即 $j^{\mu}$ 起着粒子的四维流密度矢量的作用．

---

① 泡利为解释$\beta$衰变的性质从理论上预言了中微子的存在(1931)．方程(30.1)由 Weyl 首次提出(H. Weyl, 1929)．以这些方程为基础的中微子理论为朗道、李政道、杨振宁、萨拉姆所发展(1957)．

关于中微子质量等于零的问题，迄今为止还没有从实验上最终查明．为了标识由方程(30.3)所描述的粒子，后面我们将有条件地使用“中微子”这一术语．

中微子平面波的归一化方法与 § 23 中对有质量粒子采取的方法相类似

$$\eta_p=\frac{1}{\sqrt{2\varepsilon}}u_p e^{-ipx}, \quad \eta_{-p}=\frac{1}{\sqrt{2\varepsilon}}u_{-p}e^{ipx}, \tag{30.10}$$

而旋量振幅由不变性条件

$$u^*_{\pm p}(1,\boldsymbol{\sigma})u_{\pm p}=2(\varepsilon,\boldsymbol{p}) \tag{30.11}$$

归一化. 这时,粒子密度和粒子流密度是 $j^0=1, \boldsymbol{j}=\boldsymbol{p}/\varepsilon=\boldsymbol{n}$.

既然具有一定动量的自由中微子永远是完全极化的, 那么就不存在(自旋)混合态的概念,因而可以方便地引入二阶极化"密度矩阵",它定义为二秩旋量

$$\rho_{\dot{\alpha}\dot{\beta}}=u_{\dot{\alpha}}u^*_{\dot{\beta}} \tag{30.12}$$

(这时 $\mathrm{Sp}\rho=2\varepsilon$). 注意到这个矩阵满足方程

$$(\varepsilon+\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{\sigma})\rho=\rho(\varepsilon+\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{\sigma})=0$$

由此可得到它的表达式:

$$\rho=\varepsilon-\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{\sigma}. \tag{30.13}$$

当研究各种不同的相互作用过程时, 中微子可能与别的自旋为 1/2、质量不为零的粒子同时出现,这些粒子要用四分量波函数描述. 在这种情况下为保持符号上的一致, 可在形式上也为中微子定义一个"双旋量"波函数, 只不过它的两个分量为零: $\psi=\begin{pmatrix}0\\ \eta\end{pmatrix}$. 但是一般来说,当过渡到别的(非旋量)表象时,$\psi$ 就不能保持这种形式不变. 这个困难是可以避免的,我们知道,在旋量表象中存在恒等式

$$\frac{1+\gamma^5}{2}\begin{pmatrix}\xi\\ \eta\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}0\\ \eta\end{pmatrix}, \quad (\eta^*\xi^*)\frac{1-\gamma^5}{2}=(\eta^*0),$$

式中 $\xi$ 是一个任意的"辅助"旋量, 在结果中并不出现[矩阵 $\gamma^5$ 见式(22.18)]. 所以, 如果把具有四分量的 $\psi$ 看成 $m=0$ 的狄拉克

方程

$$(\gamma p)\psi=0 \tag{30.14}$$

的解，而且遵守补充条件 $1/2(1+\gamma^5)\psi=\psi$，或者

$$\gamma^5\psi=\psi, \tag{30.15}$$

那么，在任何表象中用 $\psi$ 描述中微子时，其真正的“二分量”特性将保持不变.

将这个补充条件考虑在内的方法是，在含有 $\psi$ 和 $\bar{\psi}$ 的所有公式中，都要进行下列代换：

$$\psi\to\frac{1+\gamma^5}{2}\psi,\quad \bar{\psi}\to\bar{\psi}\frac{1-\gamma^5}{2}. \tag{30.16}$$

例如，四维流密度矢量可以写成[在表达式 $\bar{\psi}\gamma^\mu\psi$ 中进行(30.16)的代换]：

$$j^\mu=\frac{1}{4}\bar{\psi}(1-\gamma^5)\gamma^\mu(1+\gamma^5)\psi=\frac{1}{2}\bar{\psi}\gamma^\mu(1+\gamma^5)\psi. \tag{30.17}$$

按照这个法则，中微子的四阶密度矩阵变成

$$\rho=\frac{1}{4}(1+\gamma^5)(\gamma p)(1-\gamma^5)=\frac{1}{2}(1+\gamma^5)(\gamma p). \tag{30.18}$$

在旋量表象中，它应该化为式(30.13)的二阶矩阵：

$$\rho=\begin{pmatrix}0 & 0\\ \varepsilon-\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{p} & 0\end{pmatrix}.$$

对于反中微子，也有和上面类似的公式，区别是 $\gamma^5$ 前面的符号不同.

中微子是电中性粒子，但是具有上述性质的中微子不是真中性粒子. 从这些关系上我们看到，在可能的粒子状态数(而不是别的物理性质)方面，用两分量旋量描述的“中微子场”，等价于用四分量双旋量描述的真中性场. 对这种真中性场，在这里不是指螺

旋性一定的粒子和反粒子的状态，而是指具有两种可能螺旋性的一种粒子同样数目的状态，并且反演对称性将自动存在．但是我们看到，“四分量”中微子的质量等于零可以说是“偶然的”，这是因为中微子的零质量并不与它的波动方程的对称性相关（质量不为零是许可的）．所以，这种粒子的各种相互作用必然会引入虽然很小、但仍然不是严格等于零的静止质量．

## §31. 自旋为3/2的粒子的波动方程

自旋为 3/2 的粒子在其静止参考系中用三秩三维对称旋量描述（具有 $2s+1=4$ 个独立分量）。在任意参考系中，则由四维旋量 $\xi^{\alpha\dot{\beta}\dot{\gamma}}$，$\eta_{\dot{\alpha}\beta\gamma}$ 和 $\zeta^{\alpha\beta\gamma}$，$\chi_{\dot{\alpha}\dot{\beta}\dot{\gamma}}$ 描述，其中每一个四维旋量对同一类（带点的或不带点的）所有指标都对称；在反演时，每一对中的两个旋量互相交换．

为使静止参考系中的四维旋量 $\xi^{\alpha\dot{\beta}\dot{\gamma}}$ 和 $\eta_{\dot{\alpha}\beta\gamma}$ 变成对三个指标都对称的三维旋量，它们必须满足条件

$$p^{\dot{\alpha}\beta}\eta_{\dot{\alpha}\beta\gamma}=0,\ p_{\alpha\dot{\beta}}\xi^{\alpha\dot{\beta}\dot{\gamma}}=0. \tag{31.1}$$

实际上，在静止参考系中，

$$p^{\dot{\alpha}\beta}\longrightarrow p_0\delta_\alpha^\beta=m\delta_\alpha^\beta$$

［从式(20.1)可以看出此结果］．因此，条件(31.1)化成等式

$$\delta_\alpha^\beta\eta'^{\alpha}_{\ \beta\gamma}=0,\qquad \delta_\alpha^\beta\xi'^{\alpha}_{\ \beta\gamma}=0,$$

式中带撇的字母表示对应的三维旋量．换句话说，这些旋量对指标 $\alpha$、$\beta$ 缩并时结果为零，这就意味着它们对这两个指标对称，因而对三个指标都对称．

旋量 $\xi$ 和 $\eta$ 之间的微分关系是

$$p^{\delta\dot{\gamma}}\eta_{\ \alpha\delta}^{\dot{\beta}}=m\xi_\alpha^{\ \dot{\beta}\dot{\gamma}},\qquad p_{\delta\dot{\gamma}}\xi_\alpha^{\ \dot{\beta}\dot{\gamma}}=m\eta_{\ \alpha\delta}^{\dot{\beta}}. \tag{31.2}$$

由于条件(31.1)，(31.2)的左边对所有指标缩并时都为零；因而这

些量对指标 $\beta, \gamma$ 或 $\alpha$，$\delta$ 是对称的．在静止参考系中，由于方程(31.2)，三维旋量 $\xi'$ 和 $\eta'$ 相同．从方程(31.2)中消去 $\eta$ 或 $\xi$，我们看到，旋量 $\xi$ 和 $\eta$ 的每一个分量都满足二阶方程

$$(p^2-m^2)\xi^{\alpha\dot{\beta}\dot{\gamma}}=0. \tag{31.3}$$

方程(31.1)和(31.2)组成自旋为 3/2 的粒子波动方程的完全集①．旋量 $\zeta$ 和 $\chi$ 的引入没有导致任何新结果．它们是按照下列关系式建立的：

$$m\zeta^{\alpha\beta\gamma}=p^{\alpha\dot{\delta}}\eta_{\dot{\delta}}^{\ \beta\gamma},\quad m\chi_{\dot{\alpha}\dot{\beta}\dot{\gamma}}=p_{\dot{\alpha}\delta}\xi^{\delta}_{\ \dot{\beta}\dot{\gamma}}.$$

利用旋量的矢量性质(W. Rarita, J. Schwinger, 1941; A. C. Давыдов, И. Е. Тамм, 1942)可将自旋为 3/2 的粒子的方程表述成另一种形式．一对旋量指标 $\alpha\dot{\beta}$ 可比拟成一个四维矢量指标 $\mu$．那么，三秩旋量的分量 $\xi^{\alpha\dot{\beta}\dot{\gamma}}$ 可对应于具有一个矢量指标和一个旋量指标的"混合"量 $\psi_{\mu}^{\dot{\gamma}}$ 的分量．类似地，旋量 $\eta^{\dot{\beta}\alpha\gamma}$ 对应于量 $\psi_{\mu}^{\gamma}$，而两个旋量一起与"矢量性"双旋量 $\psi_{\mu}$(双旋量指标未写出)相对应．这时，波动方程变成每个矢量分量 $\psi_{\mu}$ 的"狄拉克方程"：

$$(\gamma p-m)\psi_{\mu}=0, \tag{31.4}$$

其补充条件是

$$\gamma^{\mu}\psi_{\mu}=0. \tag{31.5}$$

利用旋量表象中矩阵 $\gamma^{\mu}$ 的表达式和旋量与矢量分量之间的关系式(18.6)，(18.7)，不难证明，方程(31.2)暗含在式(31.4)中，而条件(31.5)等价于旋量 $\xi^{\alpha\dot{\beta}\dot{\gamma}}$ 和 $\eta^{\dot{\alpha}\beta\gamma}$ 对指标 $\dot{\beta}\dot{\gamma}$ 或 $\beta\gamma$ 的对称性条件．方程(31.4)乘以 $\gamma^{\mu}$，再应用条件(31.5)，我们得到

$$\gamma^{\mu}\gamma^{\nu}p_{\nu}\psi_{\mu}=0,$$

或者利用矩阵 $\gamma^{\mu}$ 的对易规则，

① 关于这些方程的拉格朗日表述，请参看 § 15 中引用的 Fierz 和 Pauli 的文章．

$$2g^{\mu\nu}p_\nu\psi_\mu-\gamma^\nu p_\nu\gamma^\mu\psi_\mu=0. \tag{31.6}$$

第二项根据(31.5)又等于零，而第一项给出

$$p^\mu\psi_\mu=0. \tag{31.7}$$

不难看出，由式(31.4)和(31.5)自动得出的这个条件与条件(31.1)等价.

最后，波动方程还有一个表述方法，就是引入量 $\psi_{ikl}(i,k,l=1,2,3,4)$，它具有三个双旋量指标并对这三个指标对称(V. Bargmann, E. P. Wigner, 1948)．这一组量等价于全部四个旋量 $\xi,\eta,\zeta,\chi$ 的分量．波动方程变成一组"狄拉克方程"：

$$p_\mu\gamma_i^{\mu}{}_m\psi_{mkl}=m\psi_{ikl}. \tag{31.8}$$

容易看出，这组方程已能给出独立分量 $\psi_{ikl}$ 的必需数目(四个)，所以，不必再提出附加条件．实际上，在静止参考系中，式(31.8)化为等式

$$\gamma_i^{0}{}_m\psi_{mkl}=\psi_{ikl},$$

按照这个等式，(在标准表象中)$i,k,l=3,4$的所有分量都等于零，即 $\psi_{ikl}$ 化为三秩三维旋量的分量.

以上结果显然可以推广到任何半整数自旋 $s$ 的粒子．当用形如(31.4)和(31.5)那样的方程描述时，波函数将是具有一个双旋量指标的 $(2s-1)/2$ 秩对称四维旋量．而用形如(31.8)的方程描述时，波函数将具有 $2s$ 个双旋量指标，且对这些指标对称.

# 第四章　外场中的粒子

## § 32. 外场中电子的狄拉克方程

从本质上讲，自由粒子的波动方程只表达与时空对称性的一般要求相关的那些性质，而这些粒子参与的物理过程则依赖于它们的相互作用的性质.

可以将经典理论和非相对论性量子理论中描述粒子电磁相互作用的方法推广到相对论性量子理论.

但是，这种方法只适用于描述像电子和正电子那样一些不能参与强相互作用的粒子间的电磁相互作用. 由此可见，现理论适用于电子的量子电动力学的广泛领域. 同样，象 $\mu$ 子这类不稳定粒子也不能参与强相互作用，它们也可用上述的量子电动力学描述. 此外，它还可用来处理比寿命(与弱相互作用相关)短得多的那些时间里发生的现象.

在本章中，我们将研究属于单体理论范围的量子电动力学问题. 在这些问题中，粒子数不改变，而相互作用可借助外电磁场的概念来引入. 在这样的理论中，外场被认为是已知的；除此而外，与所谓的“辐射修正”相联系的一些条件也限制这种理论的应用范围.

推导电子在一已知外场中的波动方程的方法，和非相对论性理论中一样(第三卷，§111). 设 $A' = (\Phi, A)$ 为外电磁场的四维势($A$ 为矢量势，$\Phi$ 为标量势). 为了得到所求的方程，只需在狄拉克方程中将四维动量算符 $p$ 换成 $p - eA$:

$$[\gamma(p - eA) - m]\psi = 0 \tag{32.1}$$

这里 $e$ 为粒子电荷①. 在式(21.13)中作同样的代换，可得到相应的哈密顿算符:

$$\hat{H}=\boldsymbol{\alpha}\cdot(\hat{\boldsymbol{p}}-e\boldsymbol{A})+\beta m+e\Phi. \tag{32.2}$$

狄拉克方程对电磁场势规范变换的不变性表现如下: 在进行变换 $A\rightarrow A+i\,p\chi$($\chi$ 为任意函数)的同时，波函数亦进行变换

$$\psi\rightarrow\psi e^{ie\chi} \tag{32.3}$$

(比较薛定谔方程的类似变换: 第三卷，§111)②，则方程的形式不变.

电流密度的波函数表达式与无外场时的公式(21.11)一样，即 $j=\bar{\psi}\gamma\psi$. 不难看出，应用方程(32.1)[和下面的方程(32.4)]，把推导式(32.11)的那些计算重复一遍，就会看到: 消去外场，连续性方程对于先前的电流表达式也是正确的.

我们来对方程(32.1)进行电荷共轭运算. 为此我们写出方程

$$\bar{\psi}[\gamma(p+eA)+m]=0. \tag{32.4}$$

和前面推导方程(21.9)的做法一样，对式(32.1)取复共轭即得到方程(32.4)(这时应记住，四维矢量 $A$ 是实的). 将这个方程写成

$$[\tilde{\gamma}(p+eA)+m]\tilde{\bar{\psi}}=0,$$

左乘以矩阵 $U_C$ 并利用关系式(26.3)，我们求出

$$[\gamma(p+eA)-m](\hat{C}\psi)=0. \tag{32.5}$$

由此可见，电荷共轭波函数所满足的方程与原方程的区别在于电荷的符号变了. 另一方面，电荷共轭运算意味着由粒子变成反粒子. 我们看到，如果粒子具有电荷，则电子和正电子的电荷一定反号.

对一阶方程 (32.1) 应用算符 $\gamma(p-eA)+m$ 就能变成二阶

① 电荷包括它的符号; 对电子而言，$e=-|e|$.

② 带有函数 $\chi(t,\boldsymbol{r})$ 的变换(32.3)有时叫"局部规范变换"，以区别含有常数相位角 $\alpha$ 的"非局部规范变换"式(12.10).

方程：

$$[\gamma^{\mu}\gamma^{\nu}(p_{\mu}-eA_{\mu})(p_{\nu}-eA_{\nu})-m^2]\psi=0.$$

乘积 $\gamma^{\mu}\gamma^{\nu}$ 可以写成

$$\gamma^{\mu}\gamma^{\nu}=\frac{1}{2}(\gamma^{\mu}\gamma^{\nu}+\gamma^{\nu}\gamma^{\mu})+\frac{1}{2}(\gamma^{\mu}\gamma^{\nu}-\gamma^{\nu}\gamma^{\mu})=g^{\mu\nu}+\sigma^{\mu\nu},$$

这里 $\sigma^{\mu\nu}$ 是反对称的"四维矩阵张量"(28.2)，给它乘以 $\sigma^{\mu\nu}$，就可由如下代换实现反对称化：

$$(p_{\mu}-eA_{\mu})(p_{\nu}-eA_{\nu})\to\frac{1}{2}\{(p_{\mu}-eA_{\mu})(p_{\nu}-eA_{\nu})\}_{-}$$

$$=\frac{1}{2}e(-A_{\mu}p_{\nu}+p_{\nu}A_{\mu}-p_{\mu}A_{\nu}+A_{\nu}p_{\mu})$$

$$=\frac{1}{2}\mathrm{i}e(\partial_{\nu}A_{\mu}-\partial_{\mu}A_{\nu})$$

$$=-\frac{\mathrm{i}e}{2}F_{\mu\nu}$$

($F_{\mu\nu}=\partial_{\mu}A_{\nu}-\partial_{\nu}A_{\mu}$ 为电磁场张量)．结果，我们得到二阶方程

$$\left[(p-eA)^2-m^2-\frac{\mathrm{i}}{2}eF_{\mu\nu}\sigma^{\mu\nu}\right]\psi=0. \qquad (32.6)$$

乘积 $F_{\mu\nu}\sigma^{\mu\nu}$ 可以通过分量

$$\sigma^{\mu\nu}=(\boldsymbol{\alpha},\mathrm{i}\boldsymbol{\Sigma}),F^{\mu\nu}=(-\boldsymbol{E},\boldsymbol{H})$$

写成三维形式，这时

$$[(p-eA)^2-m^2+e\boldsymbol{\Sigma}\cdot\boldsymbol{H}-\mathrm{i}e\boldsymbol{\alpha}\cdot\boldsymbol{E}]\psi=0 \qquad (32.7)$$

或者用通常的单位，

$$\left[\left(\frac{\mathrm{i}\hbar}{c}\frac{\partial}{\partial t}-\frac{e}{c}\Phi\right)^2-\left(\mathrm{i}\hbar\nabla+\frac{e}{c}\boldsymbol{A}\right)^2-m^2c^2+\frac{e\hbar}{c}\boldsymbol{\Sigma}\cdot\boldsymbol{H}\right.$$
$$\left.-\mathrm{i}\frac{e\hbar}{c}\boldsymbol{\alpha}\cdot\boldsymbol{E}\right]\psi=0. \qquad (32.7a)$$

方程中出现含 $\boldsymbol{E}$ 和 $\boldsymbol{H}$ 的项是由于粒子的自旋，这一点我们将在下一节进一步讨论。

当然，二阶方程的解中还有不满足原一阶方程(32.1)的“多余解”（它们是方程$[\gamma(p-eA)+m]\psi=0$的解）. 在具体情况下如何选择合适的解，通常是显而易见的. 正规的选择方法是：如果$\varphi$是二阶方程的任意解，则正确的一阶方程的解是

$$\psi=[\gamma(p-eA)+m]\varphi. \tag{32.8}$$

实际上，这个等式乘以$\gamma(p-eA)-m$后，如果$\varphi$满足方程(32.6)，则右边为零.

应该着重指出，利用代换$p\to p-eA$将外场引入相对论波动方程，这一方法并不是不言而喻的. 它的引入运用了一个补充原则：代换必须在一阶方程中进行，正因为如此，方程(32.6)中出现附加项. 要是在二阶方程中直接进行代换，这些附加项就不会出现.

外场中狄拉克方程的定态解，既可以有连续谱的态，又可以有分立谱的态. 与非相对论理论中一样，连续谱的态对应着无限运动，粒子做这种运动时可以处在无限远，因而可以看成是自由的. 由于自由粒子哈密顿算符的本征值等于$\pm\sqrt{p^2+m^2}$，因而很清楚，能量本征值连续谱出现的条件是$\varepsilon\geqslant m$和$\varepsilon\leqslant -m$. 如果$-m<\varepsilon<m$，则粒子不能处于无限远，因而运动是有限的，状态属于分立谱.

和自由粒子一样，具有“正频率”($\varepsilon>0$)和“负频率”($\varepsilon<0$)的波函数可按一定的方式纳入二次量子化表式. 对于外场中的粒子，这种表式可自然地推广如下：用狄拉克方程的归一化本征函数$\psi_n^{(+)}$和$\psi_n^{(-)}$[分别属于正频率($\varepsilon_n^{(+)}$)和负频率($-\varepsilon_n^{(-)}$)]代替公式(25.1)中的平面波，即

$$\hat{\psi}=\sum_n\{\hat{a}_n\psi_n^{(+)}\exp(-i\varepsilon_n^{(+)}t)+\hat{b}_n^+\psi_n^{(-)}\exp(i\varepsilon_n^{(-)}t)\},$$

$$\hat{\overline{\psi}}=\sum_n\hat{a}_n^+\overline{\psi}_n^{(+)}\exp(i\varepsilon_n^{(+)}t)+\hat{b}_n\overline{\psi}_n^{(-)}\exp(-i\varepsilon_n^{(-)}t)\}$$

$$\tag{32.9}$$

这时必须注意，随着势阱的加深，能级可能穿过边界 $\varepsilon=0$，即由正能级变成负能级（或者对相反符号的势，由负能级变成正能级）. 从连续性考虑，必须认为这些仍然是电子的(而不是正电子的)能级. 换句话说，当无限缓慢地移去外场时，趋于连续谱正界限($\varepsilon=m$)的一切状态都是电子的状态.

虽然电子在外场中的狄拉克方程可以解决广泛的量子电动力学问题，但同时应该强调，在相对论性理论的单体问题范围内，外场概念的适用性仍然受到限制. 这种限制与电子-正电子对的自发产生有关；当外场足够强时，就会产生电子-正电子对(参看下面的 §35, §36).

在本书中我们将不去研究在自旋不为 1/2 的粒子的波动方程中引入外场的问题，因为具有这种自旋的真实粒子是强子，强子的电磁相互作用不能用波动方程描述. 与此相联系的一点是：这类方程可能导致互相矛盾的物理结果. 例如，零自旋粒子的波动方程在足够深的势阱场中具有复能级(虚部有两种符号). 自旋为3/2的粒子的波动方程将导致因果关系的破坏，这是由于出现了超光速传播的解.

## 习　题

试确定电子在恒定磁场中的能级.

**解**　矢量势为 $A_x=A_z=0$，$A_y=Hx$(场$H$沿 $z$ 轴指向). 广义动量的分量 $p_y, p_z$(以及能量)守恒.

利用辅助函数$\varphi$的二阶方程[参看式(32.8)]，取$\varphi$为算符 $\Sigma_z$（它的本征值 $\sigma=\pm1$)以及算符 $\hat{p}_y, \hat{p}_z$ 的本征函数. $\varphi$ 的方程具有如下形式:

$$\left\{-\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}x^2}+(eHx-p_y)^2-eH\sigma\right\}\varphi=(\varepsilon^2-m^2-p_z^2)\varphi.$$

这个方程的形式与线性谐振子的薛定谔方程完全一样. 本征值 $\varepsilon$ 由公式

$$\varepsilon^2-m^2-p_z^2=|e|H(2n+1)-eH\sigma,\quad n=0,1,2,\cdots$$

给出(参看第三卷 § 112)．我们看到，按照公式(32.8)由 $\varphi$ 决定的波函数 $\psi$ 不是算符 $\Sigma_z$ 的本征函数．这与运动粒子的自旋不守恒相符合．

## § 33．按 $1/c$ 的幂展开①

我们在 § 21 中看到，在非相对论极限下($v\to 0$)，双旋量 $\psi=\begin{pmatrix}\varphi\\ \chi\end{pmatrix}$的两个分量($\chi$)为零．所以，当电子的速度很小时，$\chi\ll\varphi$．这样，只要把波函数按 $1/c$ 的幂作形式上的展开，就有可能得到只含二分量的量 $\varphi$ 的近似方程．

外场中电子的狄拉克方程可以写为：

$$i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t}=\left\{c\boldsymbol{\alpha}\cdot\left(\boldsymbol{p}-\frac{e}{c}\boldsymbol{A}\right)+\beta mc^2+e\Phi\right\}\psi. \tag{33.1}$$

粒子的相对论能量还包括静止能量 $mc^2$．为了过渡到非相对论近似，应该消去静止能量，为此，引入函数 $\psi'$ 代替 $\psi$：

$$\psi=\psi' e^{-imc^2t/\hbar}.$$

于是就有

$$\left(i\hbar\frac{\partial}{\partial t}+mc^2\right)\psi'=\left\{c\boldsymbol{\alpha}\cdot\left(\hat{\boldsymbol{p}}-\frac{e}{c}\boldsymbol{A}\right)+\beta mc^2+e\Phi\right\}\psi'.$$

将 $\psi'$ 写成 $\psi'=\begin{pmatrix}\varphi'\\ \chi'\end{pmatrix}$，我们得到方程组

$$\left(i\hbar\frac{\partial}{\partial t}-e\Phi\right)\varphi'=c\boldsymbol{\sigma}\cdot\left(\hat{\boldsymbol{p}}-\frac{e}{c}\boldsymbol{A}\right)\chi' \tag{33.2}$$

$$\left(i\hbar\frac{\partial}{\partial t}-e\Phi+2mc^2\right)\chi'=c\boldsymbol{\sigma}\cdot\left(\hat{\boldsymbol{p}}-\frac{e}{c}\boldsymbol{A}\right)\varphi' \tag{33.3}$$

(下面我们略去 $\varphi$ 和 $\chi$ 上的撇号．由于在本节中我们只用被变换了的函数 $\psi'$，因此不会引起误解)．

在一级近似下，方程(33.3)左边只剩下 $2mc^2\chi$ 一项，故有

① 在这一节中采用通常的单位．

$$\chi=\frac{1}{2mc}\boldsymbol{\sigma}\cdot\left(\hat{\boldsymbol{p}}-\frac{e}{c}\boldsymbol{A}\right)\varphi \tag{33.4}$$

(我们看到，$\chi\sim\varphi/c$)．将此式代入式(33.2)得

$$\left(\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial t}-e\Phi\right)\varphi=\frac{1}{2m}\left[\boldsymbol{\sigma}\cdot\left(\hat{\boldsymbol{p}}-\frac{e}{c}\boldsymbol{A}\right)\right]^2\varphi.$$

对于泡利矩阵，有如下关系式：

$$(\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{a})(\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{b})=\boldsymbol{a}\cdot\boldsymbol{b}+\mathrm{i}\boldsymbol{\sigma}\cdot(\boldsymbol{a}\times\boldsymbol{b}), \tag{33.5}$$

式中 $\boldsymbol{a}$，$\boldsymbol{b}$ 为任意矢量[参看式(20,9)]．在我们现在讨论的问题中，$\boldsymbol{a}=\boldsymbol{b}=\hat{\boldsymbol{p}}-\frac{e}{c}\boldsymbol{A}$，但由于 $\hat{\boldsymbol{p}}$ 和 $\boldsymbol{A}$ 不对易，矢量积 $\boldsymbol{a}\times\boldsymbol{b}$ 不为零：

$$\left[\left(\hat{\boldsymbol{p}}-\frac{e}{c}\boldsymbol{A}\right)\times\left(\hat{\boldsymbol{p}}-\frac{e}{c}\boldsymbol{A}\right)\right]\varphi=\mathrm{i}\frac{e\hbar}{c}\left[(\boldsymbol{A}\times\nabla)+(\nabla\times\boldsymbol{A})\right]\varphi$$
$$=\mathrm{i}\frac{e\hbar}{c}\mathrm{rot}\boldsymbol{A}\cdot\varphi.$$

由此可见，

$$\left[\boldsymbol{\sigma}\cdot\left(\hat{\boldsymbol{p}}-\frac{e}{c}\boldsymbol{A}\right)\right]^2=\left(\hat{\boldsymbol{p}}-\frac{e}{c}\boldsymbol{A}\right)^2-\frac{e\hbar}{c}\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{H} \tag{33.6}$$

(式中 $\boldsymbol{H}=\mathrm{rot}\boldsymbol{A}$ 为磁场)，我们得到 $\varphi$ 的方程为

$$\mathrm{i}\hbar\frac{\partial\varphi}{\partial t}=\hat{H}\varphi=\left[\frac{1}{2m}\left(\hat{\boldsymbol{p}}-\frac{e}{c}\boldsymbol{A}\right)^2+e\Phi-\frac{e\hbar}{2mc}\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{H}\right]\varphi. \tag{33.7}$$

这就是所谓的泡利方程，它和非相对论性薛定谔方程的区别在于它的哈密顿算符中的最后一项，这一项的形式是磁偶极子在外场中的势能(比较第三卷 § 111)．因此，在按 $1/c$ 展开的一级近似中，电子的行为像一个同时具有电荷和磁矩

$$\mu=\frac{e}{mc}\hbar\boldsymbol{s} \tag{33.8}$$

的粒子．这时，自旋的回转磁比率($e/mc$)要比轨道运动的回转磁

比率大一倍①.

密度 $\rho=\psi^*\psi=\varphi^*\varphi+\chi^*\chi$. 在一级近似中，第二项应该舍去，因而 $\rho=|\varphi|^2$，这正是薛定谔方程应有的结果.

流密度是

$$\boldsymbol{j}=c\psi^*\boldsymbol{\alpha}\psi=c(\varphi^*\boldsymbol{\sigma}\chi+\chi^*\boldsymbol{\sigma}\varphi).$$

根据式(33.4)，在此式中代入

$$\chi=\frac{1}{2mc}\boldsymbol{\sigma}\cdot\left(-i\hbar\nabla-\frac{e}{c}\boldsymbol{A}\right)\varphi,$$

$$\chi^*=\frac{1}{2mc}\left(i\hbar\nabla-\frac{e}{c}\boldsymbol{A}\right)\varphi^*\cdot\boldsymbol{\sigma},$$

含有两个因子 $\sigma$ 的乘积通过式(33.5)进行变换，为此将式(33.5)写成如下形式:

$$(\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{a})\boldsymbol{\sigma}=\boldsymbol{a}+i\boldsymbol{\sigma}\times\boldsymbol{a},\quad \boldsymbol{\sigma}(\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{a})=\boldsymbol{a}+i\boldsymbol{a}\times\boldsymbol{\sigma}\tag{33.9}$$

结果得到

$$\boldsymbol{j}=\frac{i\hbar}{2m}(\varphi\nabla\varphi^*-\varphi^*\nabla\varphi)-\frac{e}{mc}\boldsymbol{A}\varphi^*\varphi+\frac{\hbar}{2m}\operatorname{rot}(\varphi^*\boldsymbol{\sigma}\varphi),\tag{33.10}$$

与第三卷非相对论性理论的表达式(115.4)一致.

现在让我们继续展开到 $1/c^2$ 项，来求二级近似②. 这时我们假设只有外电场($\boldsymbol{A}=0$).

首先我们看到，当包含 $\sim1/c^2$ 项时，密度为

$$\rho=|\varphi|^2+|\chi|^2=|\varphi|^2+\frac{\hbar^2}{4m^2c^2}|\boldsymbol{\sigma}\cdot\nabla\varphi|^2,$$

它和薛定谔表达式不同. 为了在二级近似中求出与薛定谔方程对应的波动方程，必须引入另一个二分量的波函数 $\varphi_s$ 以代替 $\varphi$，它

---

① 这个著名的结论是狄拉克在 1928 年首次得到的. 满足方程(33.7)的二分量波函数是泡利在 1927 年引入的，当时狄拉克还没有发现他的方程.

② 下面我们将仿效 В. Б. 别列斯杰茨基和 Л. Д. 朗道的方法(1949).

的时间无关的积分形式为$\int|\varphi_s|^2\mathrm{d}^3x$，与薛定谔方程的一样.

为了求出所要求的变换，我们写出条件

$$\int\varphi_s^*\varphi_s\mathrm{d}^3x=\int\left\{\varphi^*\varphi+\frac{\hbar^2}{4m^2c^2}(\nabla\varphi^*\cdot\sigma)(\sigma\cdot\nabla\varphi)\right\}\mathrm{d}^3x$$

并进行分部积分：

$$\int(\nabla\varphi^*\cdot\sigma)(\sigma\cdot\nabla\varphi)\mathrm{d}^3x=-\int\varphi^*(\sigma\cdot\nabla)(\sigma\cdot\nabla)\varphi\mathrm{d}^3x$$

$$=-\int\varphi^*\Delta\varphi\mathrm{d}^3x$$

（或者 $\varphi^*$ 和 $\varphi$ 互换）．所以

$$\int\varphi_s^*\varphi_s\mathrm{d}^3x=\int\left\{\varphi^*\varphi-\frac{\hbar^2}{8m^2c^2}(\varphi^*\Delta\varphi+\varphi\Delta\varphi^*)\right\}\mathrm{d}^3x,$$

显而易见，

$$\varphi_s=\left(1+\frac{\hat{p}^2}{8m^2c^2}\right)\varphi,\qquad\varphi=\left(1-\frac{\hat{p}^2}{8m^2c^2}\right)\varphi_s.\qquad(33.11)$$

为了简化书写，我们将认为状态是稳定的，即可以用能量 $\varepsilon$（已减去静止能量）代替算符 $i\hbar\frac{\partial}{\partial t}$. 在比式 (33.4) 高一级的近似下，我们从式(33.3)得到

$$\chi=\frac{1}{2mc}\left(1-\frac{\varepsilon-e\Phi}{2mc^2}\right)(\sigma\cdot\hat{p})\varphi.$$

将它代入式(33.2)，然后按照式(33.11)用 $\varphi_s$ 代替 $\varphi$，并略去所有高于 $1/c^2$ 的项. 经过简单的计算，就得到 $\varphi_s$ 的方程 $\varepsilon\varphi_s=\hat{H}\varphi_s$，这里的哈密顿算符是

$$\hat{H}=\frac{\hat{p}^2}{2m}+e\Phi-\frac{\hat{p}^4}{8m^3c^2}-\frac{e}{4m^2c^2}\left\{(\sigma\cdot\hat{p})\Phi(\sigma\cdot\hat{p})-\frac{1}{2}\cdot(\hat{p}^2\Phi+\Phi\hat{p}^2)\right\}.$$

大括号内的表达式按照如下公式变换：

$$(\sigma\cdot\hat{p})\Phi(\sigma\cdot\hat{p})=\Phi\hat{p}^2+(\sigma\cdot\hat{p}\Phi)(\sigma\cdot\hat{p})=\Phi\hat{p}^2$$
$$+i\hbar(\sigma\cdot E)(\sigma\cdot\hat{p}),$$
$$\hat{p}^2\Phi-\Phi\hat{p}^2=-\hbar^2\Delta\Phi+2i\hbar E\cdot\hat{p}$$

式中 $E=-\nabla\Phi$ 为电场．哈密顿算符的最后表达式为

$$\hat{H}=\frac{\hat{p}^2}{2m}+e\Phi-\frac{\hat{p}^4}{8m^3c^2}-\frac{e\hbar}{4m^2c^2}\sigma\cdot(E\times p)-\frac{e\hbar^2}{8m^2c^2}\mathrm{div}E. \tag{33.12}$$

后三项是所求的 $1/c^2$ 级修正，其中第一项来自动能对动量的相对论性依赖关系(差 $c\sqrt{p^2+m^2c^2}-mc^2$ 的展开式)第二项可以叫做**自旋-轨道相互作用**能，是运动磁矩与电场的相互作用能①．最后一项只在建立外场的电荷所在点上不为零．例如，在点电荷 $Ze$ 的库仑场中，$\Delta\Phi=-4\pi Ze\delta(r)$ (C. G. Darwin, 1928)．

如果电场是中心对称的，则

$$E=-\frac{r}{r}\frac{d\Phi}{dr},$$

自旋-轨道相互作用算符可以写成

$$\frac{e\hbar}{4m^2c^2r}\sigma(r\times p)\frac{d\Phi}{dr}=\frac{\hbar^2}{2m^2c^2r}\frac{dU}{dr}\hat{l}\hat{s}. \tag{33.13}$$

这里 $\hat{l}$ 为轨道角动量算符，$\hat{s}=\frac{1}{2}\sigma$ 为电子的自旋算符，而 $U=e\Phi$ 是电子在场中的势能．

① 引用了磁矩(33.8)和速度 $v=p/m$，这个能量就变成 $-\frac{1}{2c}\mu\cdot(E\times v)$．乍看起来这个结果似乎不可靠，因为当变到随粒子一起运动的参考系时，要出现磁场 $H=\frac{1}{c}E\times v$；在这个磁场中，磁矩应具有能量 $-\mu\cdot H$．实际上，因子 1/2("托马斯 1/2"，L. Thomas, 1926)的出现与相对论不变性的普遍要求和电子的特殊性质（电子是具有一定回转磁比率的"旋量"粒子）相关(参看 § 41)．

## § 34. 氢原子能级的精细结构

我们来确定氢原子能级（即静止核的库仑场中一个电子的能级）的相对论修正①. 电子在氢原子中的速度 $v/c \sim \alpha \ll 1$, 因此，所求的修正可以用微扰理论来计算——在非微扰态（即非相对论性波函数）上求近似哈密顿量(33.12)中相对论项的平均值. 为了使结果具有较大的普遍性，我们假设核电荷等于 $Ze$，但同时认为 $Z\alpha \ll 1$.

核的场强 $\boldsymbol{E} = Ze\boldsymbol{r}/r^3$，而它的势满足方程 $\Delta\Phi = -4\pi Ze\delta(\boldsymbol{r})$. 将此式代入式(33.12)的最后三项，并考虑到电子的电荷为负，我们得到微扰算符

$$\hat{V} = -\frac{\hat{p}^4}{8m^3} + \frac{Z\alpha}{2r^3m^2}\hat{\boldsymbol{l}}\cdot\hat{\boldsymbol{s}} + \frac{Z\alpha\pi}{2m^2}\delta(\boldsymbol{r}). \tag{34.1}$$

既然是按照非相对论薛定谔方程，

$$\hat{\boldsymbol{p}}^2\psi = 2m\left(\varepsilon_0 + \frac{Z\alpha}{r}\right)\psi$$

（式中 $\varepsilon_0 = -mZ^2\alpha^2/2n^2$ 为非微扰能级，$n$ 为主量子数），则平均值

$$\overline{\boldsymbol{p}^4} = 4m^2\overline{\left(\varepsilon_0 + \frac{z\alpha}{r}\right)^2}.$$

这个量和式(34.1)中第二项的平均值一样，是利用下列公式计算出来的（参看第三卷 §36）:

$$\overline{r^{-1}} = \frac{m\alpha Z}{n^2}, \qquad \overline{r^{-2}} = \frac{(m\alpha Z)^2}{n^3(l+1/2)},$$

$$\overline{r^{-3}} = \frac{(m\alpha Z)^3}{n^3 l(l+1/2)(l+1)} \tag{34.2}$$

（最后一个的 $l \neq 0$）；本征值为

---

① 核运动对这些修正的影响是更高级小量，这里我们不考虑.

$$\boldsymbol{l}\cdot\boldsymbol{s}=\begin{cases}\frac{1}{2}\left[j(j+1)-l(l+1)-\frac{3}{4}\right], & l\neq 0\text{ 时},\\ 0, & l=0\text{ 时},\end{cases}$$

最后，第三项的平均利用了公式

$$\psi(0)=\begin{cases}\frac{1}{\sqrt{\pi}}\left(\frac{Z\alpha m}{n}\right)^{3/2}, & l=0,\\ 0, & l\neq 0.\end{cases}\tag{34.3}$$

运用上述公式对各种情况(即对 $j$ 和 $l$ 的所有值)进行简单计算可以给出结果

$$\Delta\varepsilon=-\frac{m(Z\alpha)^4}{2n^3}\left(\frac{1}{j+1/2}-\frac{3}{4n}\right).\tag{34.4}$$

公式(34.4)给出所求的氢能级能量的相对论修正，即精细结构能量①. 这里提醒一句：在非相对论性理论中，既有对自旋取向的简并，又有对 $l$ 的库仑简并. 精细结构(自旋-轨道相互作用)消除了这种简并，但并不完全：具有相同的 $n, j$，但 $l=j\pm 1/2$ 不同的能级仍然是二重简并的(这时只有对给定的 $n$，$j$ 为最大可能值 $j=j_{\max}=l_{\max}+1/2=n-1/2$ 的能级是非简并的). 因此，计及精细结构的氢能级序列如下：

$$1s_{1/2};$$
$$\underbrace{2s_{1/2}, 2p_{1/2}}, 2p_{3/2};$$
$$\underbrace{3s_{1/2}, 3p_{1/2}}, \underbrace{3p_{3/2}, 3d_{3/2}}, 3d_{5/2};$$
$$\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots$$

主量子数为 $n$ 的能级分裂成 $n$ 个精细结构分量.

应该注意，在非相对论力学中，能级在库仑场中的“偶然”简并与该场存在特殊的守恒定律相关：量 $\boldsymbol{A}$ 守恒，它的算符是

① 这个公式[以及更精确的公式(36.10)]是索末菲(A. Sommerfeld)在量子力学建立以前根据玻尔的旧量子论得出的.

$$\hat{\boldsymbol{A}}=\frac{\boldsymbol{r}}{r}+\frac{1}{2m\alpha}\{\hat{\boldsymbol{l}}\times\hat{\boldsymbol{p}}-\hat{\boldsymbol{p}}\times\hat{\boldsymbol{l}}\}$$

[参看第三卷(36.30)]．在相对论性情况下仍然存在的二重简并与特殊守恒定律的联系是：狄拉克方程的哈密顿算符 $\hat{H}=\boldsymbol{\alpha}\cdot\hat{\boldsymbol{p}}+\beta m-e^2/r$ 与算符

$$\hat{I}=\frac{\boldsymbol{r}}{r}\cdot\boldsymbol{\Sigma}+\frac{\mathrm{i}}{m\alpha}\beta(\boldsymbol{\Sigma}\cdot\hat{\boldsymbol{l}}+1)\gamma^5(\hat{H}-m\beta)$$

对易(M. H. Johnson, B. A. Lippmann, 1950)．在非相对论极限下，这个算符 $\hat{I}\longrightarrow\boldsymbol{\Sigma}\cdot\hat{\boldsymbol{A}}$

后面(§123)我们将会看到，保留下来的二重简并被所谓的辐射修正(兰姆移动)消除，这一修正在单电子问题的狄拉克方程中被忽略了．

我们在这里提前指出，这项修正的数量级是$\sim mZ^4\alpha^5\ln(1/\alpha)$．自旋-轨道相互作用的二级修正为$\sim m(Z\alpha)^6$，因而它与辐射修正的比为$\sim Z^2\alpha/\ln(1/\alpha)$．对于氢原子($Z=1$)，这个比显然很小，因而在这种情况下精确求解狄拉克方程是没有意义的．但是这对 $Z$ 很大的核场中电子的能级是有意义的(§36)．

## §35. 在有心对称场中的运动

我们来研究电子在有心对称的电场中的运动．

由于在有心场中运动的电子的角动量和宇称(相对于选为坐标原点的场心)守恒，所以，在 §24 中关于自由粒子球面波的讨论完全适用于有心场中电子波函数的角度关系，只有径向函数要改变．因此，我们将要找出如下形式的定态波函数(在标准表象中)：

$$\psi=\begin{pmatrix}\varphi\\ \chi\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}f(r)\Omega_{jlm}\\ (-1)^{\frac{1+l-l'}{2}}g(r)\Omega_{jl'm}\end{pmatrix},\qquad(35.1)$$

式中 $l=j\pm1/2$，$l'=2j-l$，引人幂$(-1)$是为了简化后面的公

式.

标准表象中的狄拉克方程给出$\varphi$和$\chi$的方程组:

$$(\varepsilon-m-U)\varphi=\boldsymbol{\sigma}\cdot\hat{\boldsymbol{p}}\chi,\qquad(\varepsilon+m-U)\chi=\boldsymbol{\sigma}\cdot\hat{\boldsymbol{p}}\varphi,\tag{35.2}$$

式中 $U(r)=e\Phi(r)$是电子在场中的势能. 将式(35.1)代入,结果归结为计算这两个方程的右边.

球旋量 $\Omega_{jl'm}$ 用 $\Omega_{jlm}$ 表示如下:

$$\Omega_{jl'm}=i^{l-l'}\left(\boldsymbol{\sigma}\cdot\frac{\boldsymbol{r}}{r}\right)\Omega_{jlm}$$

[参看式(24.8)],我们可以写出:

$$(\boldsymbol{\sigma}\cdot\hat{\boldsymbol{p}})\chi=-\mathrm{i}(\boldsymbol{\sigma}\cdot\hat{\boldsymbol{p}})(\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{r})\frac{g}{r}\Omega_{jlm}.$$

利用公式(33.5)变换乘积$(\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{p})(\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{r})$,并将矢量算符展开,我们求出

$$\begin{aligned}(\boldsymbol{\sigma}\cdot\hat{\boldsymbol{p}})\chi&=-\mathrm{i}\{\hat{\boldsymbol{p}}\cdot\boldsymbol{r}+\mathrm{i}\boldsymbol{\sigma}\cdot(\hat{\boldsymbol{p}}\times\boldsymbol{r})\}\frac{g}{r}\Omega_{jlm}\\&=\{-\mathrm{div}\boldsymbol{r}-(\boldsymbol{r}\nabla)-\boldsymbol{\sigma}\cdot(\boldsymbol{r}\times\hat{\boldsymbol{p}})\}\frac{g}{r}\Omega_{jlm}\\&=-\left\{g'+\frac{2}{r}g+\frac{g}{r}\boldsymbol{\sigma}\cdot\hat{\boldsymbol{l}}\right\}\Omega_{jlm},\end{aligned}$$

式中 $\hat{\boldsymbol{l}}=\boldsymbol{r}\times\hat{\boldsymbol{p}}$ 为轨道角动量算符,撇号表示对 $r$ 微分.乘积$\boldsymbol{\sigma}\cdot\hat{\boldsymbol{l}}=2\hat{\boldsymbol{l}}\cdot\hat{\mathbf{s}}$ 的本征值等于

$$\begin{aligned}2\boldsymbol{l}\cdot\mathbf{s}&=j^2-l^2-s^2=j(j+1)-l(l+1)-\frac{3}{4}\\&=\begin{cases}j-1/2 & l=j-1/2\text{ 时},\\-j-3/2 & l=j+1/2\text{ 时}.\end{cases}\end{aligned}$$

为了使 $l=\pm1/2$ 两种情形下公式的写法一致,引入符号

$$\kappa=\begin{cases}-(j+1/2)=-(l+1) & j=l+1/2\text{ 时},\\+(j+1/2)=l & j=l-1/2\text{ 时}.\end{cases}\tag{35.3}$$

数 $\kappa$ 取 0 以外的一切整数值(正数对应于 $j=l-1/2$ 的情形,负数对应于 $j=l+1/2$ 的情形). 这时 $\boldsymbol{l}\cdot\boldsymbol{\sigma}=-(1+\kappa)$,因而

$$(\sigma\cdot\hat{p})\chi=-\left(g'+\frac{1-\kappa}{r}g\right)\Omega_{jlm}.$$

将此式代入式 (35.2) 的第一个方程时,方程两边的球旋量 $\Omega_{jlm}$ 相消. 对第二个方程进行同样的计算,结果,对径向函数得到如下的方程组:

$$\begin{aligned} &f'+\frac{1+\kappa}{r}f-(\varepsilon+m-U)g=0,\\ &g'+\frac{1-\kappa}{r}g+(\varepsilon-m-U)f=0, \end{aligned} \tag{35.4}$$

或者

$$\begin{aligned} &(fr)'+\frac{\kappa}{r}(fr)-(\varepsilon+m-U)gr=0,\\ &(gr)'-\frac{\kappa}{r}(gr)+(\varepsilon-m-U)fr=0. \end{aligned} \tag{35.5}$$

我们来研究 $f$ 和 $g$ 在很小距离上的行为,假定 $r\to0$ 时 $U(r)$ 比 $1/r$ 增长得快. 这时在 $r$ 很小的区域内方程 (35.4) 取如下形式:

$$f'+Ug=0,\qquad g'-Uf=0.$$

它们具有实数解

$$f=\text{const}\cdot\sin\left(\int U\mathrm{d}r+\delta\right),\qquad g=\text{const}\cdot\cos\left(\int U\mathrm{d}r+\delta\right), \tag{35.6}$$

式中 $\delta$ 为任意常数. 这两个函数在 $r\to0$ 时是振荡的,不趋于任何极限. 不难看出,这种情况相当于非相对论理论中粒子"落"到中心上.

首先我们看到,距离很小这个条件对解的选择没有附加任何限制:振荡函数没有 $r=0$ 的条件,常数 $\delta$ 的选择仍然是任意的(在

$r$ 很大的区域内，对 $\varepsilon$ 的任何值，适当选择 $\delta$ 就可以使波函数有正确的行为). 为了消除这种不确定性，可以把 $r=0$ 时的奇异势看作 $r\to 0$ 时在某个 $r_0$ 点被"截止"的势的极限［即当 $r>r_0$ 时等于 $U(r)$ 而 $r<r_0$ 时等于 $U(r_0)$］. 当 $r_0$ 为有限时，当然会得到确定的能级系列，但是当 $r_0\to 0$ 时，基态的能量趋于 $-\infty$.

既然在深能级上的粒子被限制在 $r=0$ 附近的很小区域内，在非相对论理论中这正好意味着"落"到中心. 在相对论理论中，这种情况一般是不允许的. 因为这意味着系统自发产生电子-正电子对是不稳定的. 实际上，如果在真空中产生这样的粒子对需要超过 $2m$ 的能量，那么在场中，较小的能量就够了. 当电子处于能量 $\varepsilon<m$ 的束缚态时，只要花费 $\varepsilon+m<2m$ 的能量就能产生粒子对，而且是在束缚态中产生自由的正电子和电子. 如果束缚态能级的能量 $\varepsilon<-m$，这样的场可以自发地产生正电子(具有能量 $-\varepsilon>m$) 而无须消耗外来的能量. 在我们所研究的场中，当 $r_0\to 0$ 时，有无限多个这样的"反常"能级($\varepsilon<-m$). 所以，如果 $r\to 0$ 时场势 $\Phi(r)$ 比 $1/r$ 增长得快，这样的场就无法用狄拉克理论处理. 应当着重指出，这是属于两种符号的势. 虽然粒子"落"到中心只发生在吸引的情形下，但是由于 $U=e\Phi$ 的符号也与电荷的符号有关，所以，在一种情形下电子能级的行为是反常的，而在另一种情形下正电子的能级是反常的；在第二种情形下，场产生自由电子.

其次，我们来研究波函数在大距离上的行为. 如果 $r\to\infty$ 时场 $U(r)$ 衰减得非常快，那么，当确定波函数在大距离上的渐近形式时，就可以忽略方程中的场. 当 $\varepsilon>m$ 时，即在连续谱的区域内，我们回到自由运动的方程. 这时，波函数的渐近形式(球面波)与自由粒子的区别仅仅是出现了附加"相移"，其值由场在近距离上的形式决定[1]. 相移与 $j$ 和 $l$ 的值有关，或者说依赖于上面所

[1] 比较第三卷 § 33. 和非相对论理论一样，$U(r)$ 应该比 $1/r$ 衰减得快. $U\sim 1/r$ 的情形将在 § 36 中专门研究.

引入的数 $\kappa$(当然也依赖于能量 $\varepsilon$). 用 $\delta_\kappa$ 表示相移并利用自由球面波的表达式(24.7), 我们可以立即写出所求的渐近公式

$$\psi \approx \frac{2}{r}\frac{1}{\sqrt{2\varepsilon}}\begin{pmatrix} \sqrt{\varepsilon+m}\,\Omega_{jlm}\sin\left(pr-\frac{\pi l}{2}+\delta_\kappa\right) \\ -\sqrt{\varepsilon-m}\,\Omega_{jl'm}\sin\left(pr-\frac{\pi l'}{2}+\delta\right) \end{pmatrix}, \qquad (35.7)$$

或者, 考虑到定义(35.1)时:

$$\left.\begin{matrix} f \\ g \end{matrix}\right\} = \frac{\sqrt{2}}{r}\sqrt{\frac{\varepsilon\pm m}{\varepsilon}}\begin{matrix}\sin\\ \cos\end{matrix}\left(pr-\frac{\pi l}{2}+\delta_\kappa\right) \qquad (35.8)$$

式中 $p=\sqrt{\varepsilon^2-m^2}$. 公共系数在这里对应着径向函数按(24.5)归一化.

分立谱波函数($\varepsilon<m$)在 $r\to\infty$ 时按照

$$f=-\sqrt{\frac{m+\varepsilon}{m-\varepsilon}}g=\frac{A_0}{r}\exp\left(-r\sqrt{m^2-\varepsilon^2}\right) \qquad (35.9)$$

指数衰减, 式中的 $A_0$ 为常数.

和非相对论理论一样, 相移 $\delta_\kappa$(更确切地说, 量 $e^{2i\delta_\kappa}-1$)决定该场中的散射振幅(关于这一点将在 § 37 中详细讨论). 在这里我们并不着手研究这些量的解析性质(比较第三卷 § 128), 我们仅仅指出, $e^{2i\delta_\kappa}$ 作为能量的函数, 在粒子束缚态能级的对应点上仍旧具有极点. 函数 $e^{2i\delta_\kappa}$ 在这种极点上的留数, 按一定的方式与相应的分立谱波函数的渐近表达式中的系数相关. 将第三卷的非相对论公式(128.17)加以推广, 就可得到这个关系. 必要的计算与第三卷 § 128 完全类似.

将方程(35.5)对能量微分, 得

$$\left(\frac{\partial rf}{\partial\varepsilon}\right)'+\frac{\kappa}{r}\frac{\partial rf}{\partial\varepsilon}-(\varepsilon+m-U)\frac{\partial rg}{\partial\varepsilon}=rg,$$

$$\left(\frac{\partial rg}{\partial\varepsilon}\right)'-\frac{\kappa}{r}\frac{\partial rg}{\partial\varepsilon}+(\varepsilon-m-U)\frac{\partial rf}{\partial\varepsilon}=-rf.$$

这两个方程分别乘以 $rg$ 和 $-rf$，而式(35.5)的两个方程分别乘以 $-rg$ 和 $rf$，然后将四个方程逐项相加. 全部约简后，我们得到

$$\frac{\partial}{\partial r}\left[r^3\left(g\frac{\partial f}{\partial \varepsilon}-f\frac{\partial g}{\partial \varepsilon}\right)\right]=r^2(f^2+g^2).$$

将这个等式对 $r$ 积分：

$$r^2\left(g\frac{\partial f}{\partial \varepsilon}-f\frac{\partial g}{\partial \varepsilon}\right)=\int_0^r(f^2+g^2)r^2\mathrm{d}r,$$

然后求 $r\to\infty$ 时的极限. 由于归一化条件，等式右边的积分等于 1，而等式左边，函数 $f$ 和 $g$ 在渐近区域内按等式

$$rg=\frac{(rf)'}{\varepsilon+m}$$

相联系［这个等式是在忽略了有 $U$ 和有 $1/r$ 的项的条件下由式(35.5)得出的］. 结果我们得到

$$\frac{1}{\varepsilon+m}\left[(rf)'\frac{\partial rf}{\partial \varepsilon}-rf\left(\frac{\partial rf}{\partial \varepsilon}\right)'\right]=1. \tag{35.10}$$

这个公式仅仅以系数($\varepsilon+m$ 代替了 $2m$)区别于函数 $\chi$ 的类似的非相对论公式. 因此，没有必要重复随后的计算，在点 $\varepsilon=\varepsilon_0$($\varepsilon$ 为能级)附近成立的最后公式是

$$e^{2i\delta_\kappa}=(-1)^l\frac{2A_0^2}{\varepsilon-\varepsilon_0}\sqrt{\frac{m-\varepsilon_0}{m+\varepsilon_0}}, \tag{35.11}$$

式中 $A_0$ 为渐近表达式(35.9)中的系数.

## 习 题

求 $r$ 很小时波函数在场 $U\sim r^{-s}(s<1)$ 中的极限形式.

**解** 对于自由粒子，当 $r$ 很小时我们有：$f\sim r^l$，$g\sim r^{l'}$，因而当 $l<l'$ 时 $f\gg g$，而 $l>l'$ 时 $f\ll g$. 我们假设(其结果被证实)在所研究的场中这个关系式也是成立的. 当 $l<l'$(即 $l=j-1/2$，$\kappa=-l-1$)时，式(35.4)的第一个方程中含 $g$ 的项可以略去，因而仍然有 $f\sim r^l$. 第二个方程给出 $g\sim rfU$，所以 $g\sim r^{l+1-s}=r^{l'-s}$. 可以按照类似的方法研究 $l>l'$ 的情形. 结果我们

求出：

$$l<l' \text{ 时：} \quad f\sim r^{l}, g\sim r^{l'-s};$$
$$l>l' \text{ 时：} \quad f\sim r^{l-s}, g\sim r^{l'}.$$

## § 36. 在库仑场中的运动

我们从波函数在很小距离上的行为着手来研究在库仑场这种重要情形中的运动性质. 为确定起见，设场为引力场：$U=-Z\alpha/r$①.

当 $r$ 很小时，方程(35.5)中的 $\varepsilon\pm m$ 项可以忽略；这时

$$(fr)'+\frac{\kappa}{r}fr-\frac{Z\alpha}{r}gr=0,$$

$$(gr)'-\frac{\kappa}{r}gr+\frac{Z\alpha}{r}fr=0.$$

两个函数 $fr$ 和 $gr$ 平等地包含在这两个方程中，所以它们具有的同次幂：$fr=ar^{\gamma}, gr=br^{\gamma}$. 代入方程中给出

$$a(\gamma+\kappa)-bZ\alpha=0, \quad aZ\alpha+b(\gamma-\kappa)=0,$$

由此得到

$$\gamma^2=\kappa^2-(Z\alpha)^2. \tag{36.1}$$

令 $(Z\alpha)^2<\kappa^2$. 这时 $\gamma$ 为实数而且应该选择正值：相应的解或者在 $r=0$ 时不发散，或者比另一个发散得较慢. 这种选择的合理性可以通过研究在某个很小的 $r_0$ 上截止的势(如同在上一节中所阐明的那样)和取极限 $r_0\to 0$ (比较第三卷 § 35 中类似的讨论)得到证实. 这样，

$$f=\frac{Z\alpha}{\gamma+\kappa}g=\text{const}\cdot r^{-1+\gamma}, \tag{36.2}$$
$$\gamma=\sqrt{\kappa^2-Z^2\alpha^2}=\sqrt{(j+1/2)^2-Z^2\alpha^2}.$$

---

① 在通常的单位中，$U=-Ze^2/r$. 过渡到相对论单位时，$e^2$ 用无量纲的量 $\alpha$ 代替.

虽然波函数在 $r=0$ 时可能变成无限大(如果 $\gamma<1$)，但是对 $|\psi|^2$ 的积分仍然是收敛的.

如果 $(Z\alpha)^2>\kappa^2$，则由式(36.2)给出的两个 $\gamma$ 值是虚的，对应的解当 $r\to0$ 时像 $r^{-1}\cos(|\gamma|\ln r)$ 一样摆动：这又相当于"落"到中心的情形；上面已经阐述过了，在相对论性理论中这是不能容许的. 因为 $\kappa^2\geqslant1$，这意味着在狄拉克理论中只有当 $Z\alpha<1$，即 $Z<137$ 时，才能看成是纯库仑场.

现在对 $Z>137$ 时出现的情况作点定性描述. 为了避免 $r=0$ 处边界条件的不确定性，应该再次考虑在某个 $r_0$ 上的截止势(И. Я. Померанчук, Я. А. Смородинский, 1945). 这不仅具有形式上的意义，而且有直接的物理意义. $Z>137$ 的电荷事实上只可能集中在某个有限半径的"超重"核内. 因此我们来研究 $r_0$ 为已知时，能级分布如何随着 $Z$ 的增加而改变.

在"非截止"库仑场中，当 $Z\alpha=1$ 时低能级的能量 $\varepsilon_1$ 变为零，且 $\varepsilon_1(Z)$ 的相关曲线中断——当 $Z\alpha>1$ 时能级 $\varepsilon_1$ 变成虚的[参看下面的式(36.10)]. 在"截止"场中，对给定的 $r_0\neq0$，只在某个 $Z\alpha>1$ 时，能级 $\varepsilon_1$ 才通过零点. 但是 $\varepsilon_1=0$ 的意义在物理上是分不出来的；而当 $r_0\neq0$ 时，从形式上也分不出来——$\varepsilon_1(Z)$ 的相关曲线在这里不中断. 当 $Z$ 进一步增加时，能级继续下降；在达到某个确定的"临界"值 $Z=Z_c(r_0)$ 时，能量 $\varepsilon_1$ 达到低能级连续谱的边界 $(-m)$. 如上节所述，这意味着产生自由正电子所要求的能量为零. 所以，临界值 $Z_c$ 是 $r_0$ 给定的"裸"核可能具有的最大电荷.

当 $Z>Z_c$ 时，$\varepsilon_1<-m$ 的能级从能量上讲有利于产生两个电子-正电子对. 两个正电子到达无穷远处且带走 $2(|\varepsilon_1|-m)$ 的动能，而两个电子填充能级 $\varepsilon_1$. 结果形成 $K$-壳层被填满、电荷 $Z_{有效}=Z-2$ 的"离子"(С. С. Герштейн, Я. Б. Зельдович, 1969). 一直到 $Z>Z_c$ 达到下一个能级的边界 $-m$ 所对应的 $Z$ 值，这个系统都

是稳定的①.

最后我们指出，即使在点电荷的情形下，小距离上势的分布也因辐射修正而受到影响，但是辐射修正的计算对 $Z_c\alpha$ 的修正量仅为 $\sim\alpha$.

现在我们来研究波动方程的精确解 (G. Darwin, 1928; W. Gordon, 1928).

**分立谱**($\varepsilon<m$). 我们要寻找的函数 $f$ 和 $g$ 是

$$
\begin{aligned}
f&=\sqrt{m+\varepsilon}\,\mathrm{e}^{-\rho/2}\rho^{\gamma-1}(Q_1+Q_2),\\
g&=-\sqrt{m-\varepsilon}\,\mathrm{e}^{-\rho/2}\rho^{\gamma-1}(Q_1-Q_2),
\end{aligned}
\tag{36.3}
$$

式中引入了符号

$$
\rho=2\lambda r,\ \lambda=\sqrt{m^2-\varepsilon^2},\ \ \gamma=\sqrt{\kappa^2-Z^2\alpha^2}. \tag{36.4}
$$

由于我们已经知道函数在 $\rho\to0$ 时的行为(36.2)和 $\rho\to\infty$ 时的指数衰减($\sim\mathrm{e}^{-\rho/2}$)，因此，这种形式是合理的. 又由于在库仑场的情形下，当 $\rho\to\infty$ 时(35.9)的第一个等式应该满足，所以，当 $\rho\to\infty$ 时，$Q_1\gg Q_2$.

将式(36.3)代入式(35.4)，我们得到方程

$$
\rho(Q_1+Q_2)'+(\gamma+\kappa)(Q_1+Q_2)-\rho Q_2+Z\alpha\sqrt{\frac{m-\varepsilon}{m+\varepsilon}}(Q_1-Q_2)=0,
$$

$$
\rho(Q_1-Q_2)'+(\gamma-\kappa)(Q_1-Q_2)+\rho Q_2-Z\alpha\sqrt{\frac{m+\varepsilon}{m-\varepsilon}}(Q_1+Q_2)=0
$$

(撇号表示对 $\rho$ 微分). 它们的和与差给出

---

① 譬如说，如果核电荷均匀地分布在半径 $r_0=1.2\cdot10^{-12}$ cm 的球内，临界值 $Z_c=170$，下一个能级在 $Z=185$ 时到达边界 $-m$(B. C. Попов, 1970). 定量理论的详细论述可参看 Я. Б. Зельдович 和 B. C. Попов 的概述性文章 (УФН, 1971, T. 105, C. 403).

$$\rho Q_1' + \left(\gamma - \frac{Z\alpha\varepsilon}{\lambda}\right)Q_1 + \left(\kappa - \frac{Z\alpha m}{\lambda}\right)Q_2 = 0,$$
$$\rho Q_2' + \left(\gamma + \frac{Z\alpha\varepsilon}{\lambda} - \rho\right)Q_2 + \left(\kappa + \frac{Z\alpha m}{\lambda}\right)Q_1 = 0, \tag{36.5}$$

或者，消去 $Q_1$ 或 $Q_2$，

$$\rho Q_1'' + (2\gamma + 1 - \rho)Q_1' - \left(\gamma - \frac{Z\alpha\varepsilon}{\lambda}\right)Q_1 = 0,$$

$$\rho Q_2'' + (2\gamma + 1 - \rho)Q_2' - \left(\gamma + 1 - \frac{Z\alpha\varepsilon}{\lambda}\right)Q_2 = 0$$

[这里用了 $\gamma^2 - (Z\alpha\varepsilon/\lambda)^2 = \kappa^2 - (Z\alpha m/\lambda)^2$]. 这两个方程的解在 $\rho = 0$ 时是有限的：

$$Q_1 = AF\left(\gamma - \frac{Z\alpha\varepsilon}{\lambda}, 2\gamma + 1, \rho\right),$$
$$Q_2 = BF\left(\gamma + 1 - \frac{Z\alpha\varepsilon}{\lambda}, 2\gamma + 1, \rho\right) \tag{36.6}$$

式中 $F(\alpha, \beta, z)$ 是合流超几何函数. 令式(36.5)的任何一个方程中 $\rho = 0$，我们求出常数 $A$ 和 $B$ 之间的关系：

$$B = -\frac{\gamma - Z\alpha\varepsilon/\lambda}{\kappa - Z\alpha m/\lambda}A. \tag{36.7}$$

式(36.6)中的两个超几何函数应该化为多项式（否则当 $\rho \to \infty$ 时它们将按 $e^{\rho}$ 增长，因而所有的波函数将按 $e^{\rho/2}$ 增长）. 如果参数 $\alpha$ 等于负整数或零，则函数 $F(\alpha, \beta, z)$ 就是多项式. 我们引入符号 $n_r$：

$$\gamma - \frac{Z\alpha\varepsilon}{\lambda} = -n_r. \tag{36.8}$$

如果 $n_r = 1, 2, \cdots$，两个超几何函数就化为多项式. 如果 $n_r = 0$，则其中只有一个是多项式. $n_r = 0$ 意味着 $\gamma = Z\alpha\varepsilon/\lambda$，这时不难证明，$Z\alpha m/\lambda = |\kappa|$. 如果 $\kappa < 0$，则系数 $B$ 等于零，因而 $Q_2 = 0$，所要求的条件被满足. 而如果 $\kappa > 0$，则 $B = -A$，$n_r = 0$ 时 $Q_2$ 仍然发散. 由此可见，量子数 $n_r$ 的容许值是

$$n_r=\begin{cases}0,1,2,\cdots & \kappa<0\text{时};\\ 1,2,3,\cdots & \kappa>0\text{时}.\end{cases} \tag{36.9}$$

根据定义(36.8)，我们求出分立能级的表达式如下：

$$\frac{\varepsilon}{m}=\left[1+\frac{(Z\alpha)^2}{(\sqrt{\kappa^2-(Z\alpha)^2}+n_r)^2}\right]^{-1/2}. \tag{36.10}$$

特别是，基态能级 $1s_{1/2}(|\kappa|=1, n_r=0)$ 的能量为：

$$\varepsilon_1=m\sqrt{1-(Z\alpha)^2}.$$

当 $Z\alpha\ll1$ 时，公式(36.10)的展开式的首项是

$$\frac{\varepsilon}{m}-1=-\frac{(Z\alpha)^2}{2(|\kappa|+n_r)^2}\left\{1+\frac{(Z\alpha)^2}{|\kappa|+n_r}\left[\frac{1}{|\kappa|}-\frac{3}{4(|\kappa|+n_r)}\right]\right\}.$$

利用符号 $n_r+|\kappa|=n(=1,2,\cdots)$ 并注意到 $|\kappa|=j+1/2$，我们就回到早先利用微扰论所得到的公式(34.4)．正如在§34末所指出的，这个展开式后面的项没有意义，辐射修正项明显地超过这些项．但是，公式(36.10)在 $Z\alpha\sim1$ 时的精确形式是有意义的．我们看到，近似公式(34.4)所表示出来的能级的二重简并在精确公式中也是存在的：因为精确公式中只含 $|\kappa|$，所以 $j$ 相同而 $l$ 不同的能级仍然是重合的．

在波函数中我们还要确定公共归一化系数 $A$．照例，分立谱波函数的归一化条件是 $\int|\psi|^2d^3x=1$；对于函数 $f$ 和 $g$，这意味着条件

$$\int_0^\infty(f^2+g^2)r^2dr=1.$$

求 $A$ 的最简单方法是从函数在 $r\to\infty$ 时的渐近形式出发．利用渐近公式

$$F(-n_r,2\gamma+1,\rho)\approx\frac{\Gamma(2\gamma+1)}{\Gamma(n_r+2\gamma+1)}(-\rho)^{n_r}$$

[参看第三卷(d, 14)]，我们求出

$$f \approx (-1)^{n_r} A\sqrt{m+\varepsilon}\,\frac{\Gamma(2\gamma+1)}{\Gamma(n_r+2\gamma+1)}\mathrm{e}^{-\lambda r}(2\lambda r)^{\gamma+n_r-1}.$$

将这个公式与下面将要导出的表达式(36.22)比较．就能确定 $A$．然后将以上公式收集在一起，我们就能完全地写出归一化波函数的最后表达式:

$$\left.\begin{matrix} f \\ g \end{matrix}\right\} = \frac{\pm(2\lambda)^{3/2}}{\Gamma(2\gamma+1)}\left[\frac{(m\pm\varepsilon)\Gamma(2\gamma+n_r+1)}{4m\frac{Z\alpha m}{\lambda}\left(\frac{Z\alpha m}{\lambda}-\kappa\right)n_r!}\right]^{1/2}(2\lambda r)^{\gamma-1}\mathrm{e}^{-\lambda r}\times$$

$$\times\left\{\left(\frac{Z\alpha m}{\lambda}-\kappa\right)F(-n_r,2\gamma+1,2\lambda r)\right.$$

$$\left.\mp n_r F\cdot(1-n_r,2\gamma+1,2\lambda r)\right\} \qquad (36.11)$$

(上面的符号属于 $f$，下面的属于 $g$)．

**连续谱**$(\varepsilon>m)$．没有必要重新解连续谱状态的波动方程．这种情况的波函数，可以通过代换①

$$\sqrt{m-\varepsilon}\longrightarrow -i\sqrt{\varepsilon-m},\ \lambda\longrightarrow -ip,\ -n_r\longrightarrow\gamma-i\frac{Z\alpha\varepsilon}{p} \qquad (36.12)$$

由分立谱波函数得到(关于根$\sqrt{m-\varepsilon}$在解析延拓时的符号选择，参看第三卷 § 128)．但是应该重新进行函数的归一化．

在式(36.11)中进行这些代换，函数 $f$ 和 $g$ 可以写成

$$\left.\begin{matrix} f \\ g \end{matrix}\right\} = \left.\begin{matrix} \sqrt{\varepsilon+m} \\ \mathrm{i}\sqrt{\varepsilon+m} \end{matrix}\right\}\cdot A'\mathrm{e}^{\mathrm{i}pr}(2pr)^{\gamma-1}\times$$

$$\times[\mathrm{e}^{\mathrm{i}\xi}F(\gamma-\mathrm{i}\nu,2\gamma+1,-2\mathrm{i}pr)\mp e^{-\mathrm{i}\xi}F(\gamma+1-\mathrm{i}\nu,2\gamma+1,-2\mathrm{i}pr)],$$

式中 $A'$ 是另一个归一化常数，而且

$$\nu=\frac{Z\alpha\varepsilon}{p},\quad \mathrm{e}^{-2\mathrm{i}\xi}=\frac{\gamma-\mathrm{i}\nu}{\kappa-\mathrm{i}\nu\frac{m}{\varepsilon}} \qquad (36.13)$$

---

① 在本节的下面部分，$p$ 代表 $|\boldsymbol{p}|=\sqrt{\varepsilon^2-m^2}$．

由于 $\gamma^2+(Z\alpha\varepsilon/p)^2=\kappa^2+(Z\alpha m/p)^2$, $\xi$ 是实数量.

根据公式

$$F(\alpha,\beta,z)=e^zF(\beta-\alpha,\beta,-z)$$

[参看第三卷(d, 10)], 我们有

$$F(\gamma+1-i\nu,2\gamma+1,-2ipr)=e^{-2ipr}F(\gamma+i\nu,2\gamma+1,2ipr)$$
$$=e^{-2ipr}F^*(\gamma-i\nu,2\gamma+1,-2ipr)$$

所以

$$\left.\begin{matrix}f\\g\end{matrix}\right\}=2iA'\sqrt{\varepsilon\pm m}\,(2pr)^{\gamma-1}\frac{\mathrm{Im}}{\mathrm{Re}}\{e^{i(pr+\xi)}F(\gamma-i\nu,2\gamma+1,-2ipr)\} \tag{36.14}$$

将这个函数的渐近表达式与归一化球面波的一般表达式(35.7)进行比较，就可以决定归一化系数 $A$. 我们直接写出用这种方法得到的连续谱波函数的表达式(然后对它加以验证)①:

$$\left.\begin{matrix}f\\g\end{matrix}\right\}=2^{3/2}\sqrt{\frac{m\pm\varepsilon}{\varepsilon}}e^{\frac{\pi\nu}{2}}\frac{|\Gamma(\gamma+1+i\nu)|}{\Gamma(2\gamma+1)}\frac{(2pr)^\gamma}{r}\times$$
$$\times\frac{\mathrm{Im}}{\mathrm{Re}}\left\{e^{i(pr+\xi)}F(\gamma-i\nu,2\gamma+1,-2ipr)\right\}. \tag{36.15}$$

这个函数的渐近表达式可以利用第三卷的公式(d, 14)求出，而现在只有该公式的第一项才有意义(第二项按 $1/r$ 的高次幂减小):

$$\left.\begin{matrix}f\\g\end{matrix}\right\}=\frac{\sqrt{2}}{r}\sqrt{\frac{\varepsilon\pm m}{\varepsilon}}\begin{matrix}\sin\\\cos\end{matrix}\left(pr+\delta_\kappa+\nu\ln 2pr-\frac{\pi l}{2}\right), \tag{36.16}$$

式中

$$\delta_\kappa=\xi-\arg\Gamma(\gamma+1+i\nu)-\frac{\pi\gamma}{2}+\frac{\pi l}{2}, \tag{36.17}$$

或

① 斥力场中的波函数可改变 $Z\alpha$ 前的符号(即改变 $\nu$ 的符号)得到.

$$e^{2i\delta_\kappa}=\frac{\kappa-i\nu m/\varepsilon}{\gamma-i\nu}\frac{\Gamma(\gamma+1-i\nu)}{\Gamma(\gamma+1+i\nu)}e^{i\pi(l-\gamma)}. \qquad (36.18)$$

为了将来参考方便，我们指出极端相对论情形($\varepsilon\gg m,\nu\approx Z\alpha$)下的相位表达式:

$$e^{2i\delta_\kappa}=\frac{\kappa}{\gamma-iZ\alpha}\frac{\Gamma(\gamma+1-iZ\alpha)}{\Gamma(\gamma+1+iZ\alpha)}e^{i\pi(l-\gamma)}. \qquad (36.19)$$

表达式(36.16)与(35.8)的区别只是三角函数宗量中的对数项. 正如在薛定谔方程中那样，库仑场的缓慢衰减导致波相畸变，波相畸变又变成 $r$ 的变化缓慢的函数.

在 $\varepsilon<m$ 的区域内进行解析延拓时，表达式(36.18)取如下形式:

$$e^{2i\delta_\kappa}=\frac{\kappa-Z\alpha m/\lambda}{\gamma-Z\alpha m/\lambda}\frac{\Gamma(\gamma+1-Z\alpha\varepsilon/\lambda)}{\Gamma(\gamma+1+Z\alpha\varepsilon/\lambda)}e^{i\pi(l-\gamma)}. \qquad (36.20)$$

这个表达式在下列各点上有极点: $\gamma+1-Z\alpha\varepsilon/\lambda=1-n_r$, $n_r=1,2,\cdots$(分子上 $\Gamma$-函数的极点)，还有点 $\gamma-Z\alpha\varepsilon=-n_r=0$ (如果这时 $\kappa<0$). 正如所期待的，这些点与分立能级相合.

在 $n_r\neq0$ 的任何极点附近，我们有

$$e^{2i\delta_\kappa}\approx\frac{\left(\frac{Z\alpha m}{\lambda}-\kappa\right)e^{i\pi(l-\gamma)}}{n_r\Gamma(2\gamma+1+n_r)}\Gamma\left(\gamma+1-\frac{Z\alpha\varepsilon}{\lambda}\right).$$

它的极点附近的 $\Gamma$-函数，可以利用公式 $\Gamma(z)\Gamma(1-z)=\pi/\sin\pi z$ 求出:

$$\Gamma\left(\gamma+1-\frac{Z\alpha\varepsilon}{\lambda}\right)\approx\frac{\pi}{\Gamma(n_r)\sin\pi(\gamma+1-Z\alpha\varepsilon/\lambda)},$$

$$\sin\pi\left(\gamma+1-\frac{Z\alpha\varepsilon}{\lambda}\right)\approx\pi\cos\pi n_r\cdot\frac{d}{d\varepsilon}\left(\frac{Z\alpha\varepsilon}{\lambda}\right)\cdot(\varepsilon-\varepsilon_0)$$

$$=(-1)^{n_r}\frac{\pi Z\alpha m^2}{\lambda^3}(\varepsilon-\varepsilon_0)$$

式中 $\varepsilon_0$ 为能级. 由此可见①,

$$e^{2i\delta_\kappa}\approx(-1)^{l+n_r}\frac{e^{-i\pi\gamma}\left(\dfrac{Z\alpha m}{\lambda}-\kappa\right)}{n_r!\,\Gamma(2\gamma+1+n_r)}\frac{\lambda^3}{Z\alpha m^2}\frac{1}{\varepsilon-\varepsilon_0}. \quad (36.21)$$

在上节末曾经得到公式(35.11), 它把函数 $e^{2i\delta_\kappa}$ 在其极点上的留数与相应束缚态波函数渐近表达式中的系数联系起来. 但是在库仑场的情形下,这个公式应该稍加改变,因为式(35.7)中的恒定相移 $\delta_\kappa$ 在式(36.16)中被 $\delta_\kappa+\nu\ln(2pr)$代替,所以式(35.11)的左边不能写成 $e^{2i\delta_\kappa}$,而应该写成

$$\exp(2i\delta_\kappa+2i\nu\ln2pr)\longrightarrow e^{2i\delta_\kappa}(2i\lambda r)^{2(n_r+\gamma)}.$$

利用式(36.21)并由式(35.11)定出系数 $A_0$ (它现在将是 $r$ 的幂函数),我们求出分立谱归一化波函数的渐近形式:

$$f=\left[\frac{(Z\alpha m/\lambda-\kappa)(m+\varepsilon)\lambda^2}{2n_r!\,Z\alpha m^2\Gamma(2\gamma+1+n_r)}\right]^{1/2}\frac{e^{-\lambda r}}{r}(2\lambda r)^{n_r+\gamma}. \quad (36.22)$$

这个公式在确定函数(36.11)中的系数时已经用过了.

## §37. 在有心对称场中的散射

粒子在力心固定的场中散射时,波函数的渐近表达式为②

$$\psi=u_{\varepsilon p}e^{ipz}+u'_{\varepsilon p'}\frac{e^{ipr}}{r}. \quad (37.1)$$

这里 $u_{\varepsilon p}$ 是入射平面波的双旋量振幅. 双旋量 $u'_{\varepsilon p'}$ 是散射方向 $\boldsymbol{n}'$ 的函数,每给出一个 $\boldsymbol{n}'$ 值, 它的形状(当然不是它的归一化形式)都与 $\boldsymbol{n}'$ 方向上传播的平面波的双旋量振幅一样.

我们在 § 24 中曾经看到, 平面波的双旋量振幅完全决定于二分量的量——三维旋量 $w$, 它是粒子的静止参考系中的非相对论性波函数. 这个旋量可以表示通量密度: 它正比于 $w^*w$ (其比例

① 不难看出,这个公式在 $n_r=0$ 的情形下仍然是正确的.

② 在 § 37, § 38 中, $p$ 代表$|\boldsymbol{p}|$, 而 $\varepsilon$ 和 $\boldsymbol{p}$ 是分别作为振幅指标写出的.

系数仅仅依赖于能量 $\varepsilon$，因而对于入射粒子和散射粒子是相同的）．所以，散射截面 $d\sigma=(w'^*w'/w^*w)do$，或者像 § 24 中那样，由入射波的归一化条件 $w^*w=1$ 得

$$d\sigma=w'^*w'do.$$

我们引入散射算符 $\hat{f}$，它的定义式是

$$w'=\hat{f}w. \tag{37.2}$$

由于量 $w, w'$ 有两个分量，这样定义的算符就与非相对论散射理论中考虑了自旋的散射振幅算符完全相似（第三卷 § 140）．因此，可以直接应用在那里所得到的通过波函数在散射场中的相移来表示算符的公式，为此只需将第三卷 § 140 中引入的相移 $\delta_l^+$ 和 $\delta_l^-$ 用相对论公式（35.7）中所出现的 $\delta_\kappa$ 表示出来．值得注意的是，$\delta_l^+$ 和 $\delta_l^-$ 是轨道角动量为 $l$，总角动量为 $j=l+1/2$ 和 $j=l-1/2$ 的状态的相位．按照定义（35.3），$j=l+1/2$ 时 $\kappa=-l-1$，$j=l-1/2$ 时 $\kappa=l$．所以我们应该进行改换

$$\delta_l^+\longrightarrow\delta_{-(l+1)},\quad \delta_l^-\longrightarrow\delta_l$$

（请注意，$\delta$ 的指标现在代表 $\kappa$ 的值！）．因此，我们得到下列公式：

$$\hat{f}=A+B\boldsymbol{\nu}\cdot\boldsymbol{\sigma}, \tag{37.3}$$

$$A=\frac{1}{2ip}\sum_{l=0}^{\infty}[(l+1)(e^{2i\delta_{-l-1}}-1)+l(e^{2i\delta_l}-1)]P_l(\cos\theta), \tag{37.4}$$

$$B=\frac{1}{2p}\sum_{l=1}^{\infty}(e^{2i\delta_{-l-1}}-e^{2i\delta_l})P_l^1(\cos\theta), \tag{37.5}$$

式中 $\boldsymbol{\nu}$ 是方向 $\boldsymbol{n}\times\boldsymbol{n}'$ 上的单位矢量．

由于 $w$ 是静止参考系中的旋量波函数，所以，散射的极化性质要借助 $\hat{f}$ 用和第三卷 § 140 中相同的公式描述．

在库仑场的情形下，有可能把 $A(\theta)$ 和 $B(\theta)$ 通过一个函数表

示出来，其计算过程简述如下①：

对于库仑场，相位 $\delta_\kappa$ 由公式(36.18)给出，它的形式是

$$
\begin{aligned}
e^{2i\delta_\kappa} &= -\left(\kappa - i\frac{Ze^2m}{p}\right)\frac{\kappa}{|\kappa|}C_\kappa, \\
C_\kappa &= -\frac{\Gamma(\gamma - i\nu)}{\Gamma(\gamma + 1 + i\nu)}e^{i\pi(|\kappa| - \gamma)}
\end{aligned}
\tag{37.6}
$$

(我们看到，$\kappa>0$ 时 $e^{i\pi l}=e^{i\pi\kappa}$，$\kappa<0$ 时 $e^{i\pi l}=-e^{i\pi\kappa}$)．利用这样引入的量，级数(37.4)，(37.5)可以写成

$$
\begin{aligned}
A(\theta) &= \frac{1}{p}G(\theta) - i\frac{Ze^2m}{p^2}F(\theta), \\
B(\theta) &= -\frac{i}{p}\operatorname{tg}\frac{\theta}{2}\cdot G(\theta) + \frac{Ze^2m}{p^2}\operatorname{ctg}\frac{\theta}{2}\cdot F(\theta),
\end{aligned}
\tag{37.7}
$$

式中

$$
G(\theta) = \frac{i}{2}\sum_{l=1}^{\infty} l^2 C_l (P_l + P_{l-1}),\ F(\theta) = \frac{i}{2}\sum_{l=1}^{\infty} l C_l (P_l - P_{l-1}). \tag{37.8}
$$

级数 $B(\theta)$ 变换时利用了勒让德多项式之间的下列递推公式：

$$
P_l^1 + P_{l-1}^1 = -\operatorname{ctg}\frac{\theta}{2}\cdot l(P_l - P_{l-1}), \tag{37.9}
$$

$$
P_l^1 - P_{l-1}^1 = \operatorname{tg}\frac{\theta}{2}\cdot l(P_l + P_{l-1}). \tag{37.10}
$$

另一方面，按照恒等式

$$
\begin{aligned}
&(1+\cos\theta)\frac{d}{d\cos\theta}[P_l(\cos\theta) - P_{l-1}(\cos\theta)] \\
&= l[P_l(\cos\theta) + P_{l-1}(\cos\theta)],
\end{aligned}
\tag{37.11}
$$

函数 $F(\theta)$ 和 $G(\theta)$ 以关系式

$$
G = (1-\cos\theta)\frac{dF}{d\cos\theta} = -\operatorname{ctg}\frac{\theta}{2}\frac{dF}{d\theta} \tag{37.12}
$$

① Gluckstern R. L., Lin S. R. //J. *Math. Phys*, 1964, V. 5, P. 1594.

互相联系. 这样，$A(\theta)$和$B(\theta)$就通过一个函数$F(\theta)$表示出来①.

## § 38. 极端相对论情形中的散射

现在我们专门研究极端相对论情形（$\varepsilon \gg m$）中的散射. 在第一级近似中，我们完全忽略波动方程中的质量$m$. 这时对$\psi$应用旋量表象$\psi=\begin{pmatrix}\xi\\ \eta\end{pmatrix}$比较方便，因为$\xi$和$\eta$的方程当$m=0$时可以分开:

$$-\mathrm{i}\boldsymbol{\sigma}\cdot\nabla\xi=(\varepsilon-U)\xi, \quad -\mathrm{i}\boldsymbol{\sigma}\cdot\nabla\eta=-(\varepsilon-U)\eta \tag{38.1}$$

(具有“中微子”形式, § 30).

在$\boldsymbol{p}$方向上极化的电子的螺旋性状态对应于波函数$\psi=\begin{pmatrix}\xi\\ 0\end{pmatrix}$,而对于和$\boldsymbol{p}$相反的极化方向上有$\psi=\begin{pmatrix}0\\ \eta\end{pmatrix}$. 由于$\xi$和$\eta$的方程可以分开,显然这个性质在散射时不会改变. 换句话说,在极端相对论电子散射中,螺旋性守恒. 由对称性(纵向极化)考虑,显然，在纵向极化的螺旋性粒子的散射中没有方位对称性. 还可以断言,螺旋性电子的散射截面与螺旋性的符号无关,这是因为有心力场对反演变换不变,而螺旋性在反演时变号.

在极端相对论情形中，公式(37.3)—(37.5)可以大大简化(D. R. Yennie, D. G. Ravenhall, R. N. Wilson, 1954).

譬如说，令入射电子的极化沿着运动方向$\boldsymbol{n}$. 对于有一定$\boldsymbol{n}\cdot\boldsymbol{\sigma}$值的平面波来说，旋量$\xi[=(\varphi+\chi)/\sqrt{2}]$正比于波的标准表象中出现的三维旋量$w$. 因此，在新的表象中，入射波和散射波的旋量振幅之间的关系仍然用同样的算符$\hat{f}$给出.

由于散射的结果,极化矢量随动量一起转到方向$\boldsymbol{n}'$上. 所以,

① 函数$F(\theta)$不能通过基本函数表示成封闭形式,但是可以写成确定的二重积分的形式——参看上一注解所指出的论文.

算符 $\hat{f}$ 对电子自旋波函数的作用归结为自旋绕 $\boldsymbol{\nu}$ 轴转动 $\theta$角($\boldsymbol{n}$ 和 $\boldsymbol{n}'$ 的夹角). 这样的转动又等价于坐标系绕同一轴在相反方向上转动,即转动 $-\theta$ 角. 由此得出, $\hat{f}$ 应该与坐标系作上述改变时波函数的变换算符 [即作代换 $\theta\to-\theta$ 的算符(18.17)]相同(只差一个系数). 比较式(37.3)与(18.17)我们求出:

$$\frac{B}{A}=-\mathrm{itg}\,\frac{\theta}{2}. \tag{38.2}$$

所以,在极端相对论极限下,

$$\hat{f}=A(\theta)\left[1-\mathrm{itg}\,\frac{\theta}{2}\cdot(\boldsymbol{\nu}\cdot\boldsymbol{\sigma})\right]. \tag{38.3}$$

如果利用同一极限下相位 $\delta_\kappa$ 和 $\delta_{-\kappa}$ 之间的关系式, $A(\theta)$ 的表达式(37.4)也可以简化. 为了推导这个关系式,我们注意到,当删去有 $m$ 的项以后,函数 $f$ 和 $g$ 的方程(35.4)对代换

$$\kappa\to-\kappa,\ \ f\to g,\ \ g\to-f$$

不变, 这种代换并不影响粒子或场自身的参数. 所以, 必定有 $f_\kappa/g_\kappa=-g_{-\kappa}/f_{-\kappa}$, 代入渐近表达式以后得出

$$\mathrm{tg}\left(pr-\frac{l\pi}{2}+\delta_\kappa\right)=-\mathrm{ctg}\left(pr-\frac{l'\pi}{2}+\delta_{-\kappa}\right),$$

$$\delta_\kappa=\delta_{-\kappa}-(l'-l)\frac{\pi}{2}+\left(n+\frac{1}{2}\right)\pi,$$

由此得出

$$\mathrm{e}^{2\mathrm{i}\delta_\kappa}=\mathrm{e}^{2\mathrm{i}\delta_{-\kappa}}. \tag{38.4}$$

利用这个关系式[并在式(37.4)的第一项中用 $l-1$ 代替求和指标 $l$],我们得到

$$A(\theta)=\frac{1}{2\mathrm{i}p}\sum_{l=1}^{\infty}l(\mathrm{e}^{2\mathrm{i}\delta_l}-1)[P_l(\cos\theta)+P_{l-1}(\cos\theta)] \tag{38.5}$$

由式(38.2)得出, $\mathrm{Re}(AB^*)=0$. 这意味着在所考虑的近似下,截面和粒子的初始极化无关,非极化束在散射后仍然是非极化

的[参看第三卷公式(140.8)—(140.10)]. 我们还看到，当 $\theta\to\pi$ 时，$A(\theta)$ 的表达式(38.5) 像 $(\pi-\theta)^2$ 一样趋于零[因为 $P_l(-1)=(-1)^l$]. 同时趋于零的还有截面

$$\frac{d\sigma}{do}=|A|^2+|B|^2=\frac{|A(\theta)|^2}{\cos^2\frac{\theta}{2}}. \tag{38.6}$$

这些性质在小量 $m/\varepsilon$ 的较高级近似中自然不会发生. 特别是，分析表明，当 $\theta\to\pi$ 时，截面趋于和 $(m/\varepsilon)^2$ 成正比的极限.

对于极端相对论情形中的库仑场，相位 $\delta_\kappa$ 不依赖于能量，这由式(36.19)显而易见①. 所以，在纯库仑场中，当 $\varepsilon\gg m$ 时，散射截面的形式是

$$d\sigma=\frac{\tau(\theta)}{\varepsilon^2}do, \tag{38.7}$$

式中的 $\tau$ 仅仅是角度的函数.

## §39. 库仑场中散射的连续谱波函数系

我们将在后面(§95, §96)研究极端相对论电子在重核($Z\alpha\sim 1$)场中散射时所发生的各种非弹性过程. 为了计算相应的矩阵元，我们需要这样的波函数：它们在 $r\to\infty$ 时的渐近形式应该是平面波和球面波的叠加.

我们将看到，在极端相对论情形下(电子能量 $\varepsilon\gg m$)，由电子传递给核的动量值 $q=|\mathbf{p}'-\mathbf{p}|\sim m$ 在散射中起主要作用. 与这个 $q$ 值对应的"碰撞参数"为 $\rho\sim 1/q\sim 1/m$，电子的偏转角度②

$$\theta\sim\frac{q}{p}\sim\frac{m}{\varepsilon}. \tag{39.1}$$

---

① 这由方程(38.1)直接可见，因为对库仑场来说，能量 $\varepsilon$ 一般可以通过代换 $r\to r'/\varepsilon$ 从方程中消去.

② 在本节中，$p$ 代表 $|\mathbf{p}|$.

从坐标 $r$(到中心的距离)和 $z=r\cos\theta$ 来看，这意味着区域

$$\rho\equiv r\sin\theta\sim\frac{1}{m},\qquad p(r-z)=pr(1-\cos\theta)\sim 1. \tag{39.2}$$

这时 $r\sim\varepsilon/m^2$,可见所涉及的距离是很大的.

我们把狄拉克方程写成

$$(\varepsilon-U-m\beta+\mathrm{i}\boldsymbol{\alpha}\cdot\nabla)\psi=0,\qquad U=-\frac{Z\alpha}{r}. \tag{39.3}$$

将它变成二阶方程，为此，将算符 $(\varepsilon-U+m\beta-\mathrm{i}\boldsymbol{\alpha}\cdot\nabla)$ 应用于(39.3):

$$(\Delta+p^2-2\varepsilon U)\psi=(-\mathrm{i}\boldsymbol{\alpha}\cdot\nabla U-U^2)\psi. \tag{39.4}$$

由于在所考虑的区域内 $r\gg Z\alpha/\varepsilon$,所以 $U\ll\varepsilon$. 在一级近似中,式(39.4)的右边可以忽略,剩下的方程

$$\left(\Delta+p^2+\frac{2\varepsilon Z\alpha}{r}\right)\psi=0 \tag{39.5}$$

与库仑场中的非相对论性薛定谔方程

$$\left(\frac{1}{2m}\Delta+\frac{p^2}{2m}+\frac{Z\alpha}{r}\right)\psi=0 \tag{39.5a}$$

在形式上是一样的,区别仅仅是参数符号的明显改变(在“势能”中包含一个额外因子 $\varepsilon/m$). 因此,我们可以直接写出具有所要求的渐近形式的解(参看第三卷 § 136).

例如，包含渐近平面波($\propto e^{i\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{r}}$)和向外散开的球面波的波函数具有如下形式:

$$\begin{gathered}\psi_{\varepsilon p}^{(+)}=C\frac{u_{\varepsilon p}}{\sqrt{2\varepsilon}}e^{i\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{r}}F\left[\frac{iZ\alpha}{p},1,i(pr-\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{r})\right],\\ C=e^{\pi Z\alpha\varepsilon/2p}\Gamma\left(1-i\frac{Z\alpha\varepsilon}{p}\right),\end{gathered} \tag{39.6}$$

式中 $F$ 为合流超几何函数，$u_{\varepsilon p}$ 是平面波的恒定双旋量振幅,其归一化条件是我们在(23.4)中所采用过的

$$\bar{u}_{\varepsilon p}u_{\varepsilon p}=2m. \tag{39.7}$$

波函数(39.6)的归一化应该使平面波的渐近表达式具有通常的形式

$$\frac{u_{\varepsilon p}}{\sqrt{2\varepsilon}}e^{i\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{r}},$$

这相当于在单位体积中有一个粒子. 由于在极端相对论情形下 $p\approx\varepsilon$,在式(39.6)中可以假设 $Z\alpha\varepsilon/p\approx Z\alpha$:

$$\psi_{\varepsilon p}^{(+)}=C\frac{u_{\varepsilon p}}{\sqrt{2\varepsilon}}e^{i\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{r}}\ F[iZ\alpha,1,i(pr-\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{r})], \tag{39.8}$$

$$C=e^{Z\alpha\pi/2}\Gamma(1-iZ\alpha).$$

应该注意的是,虽然我们研究的距离非常大,以致于 $pr\gg1$,但是式(39.8)中的合流超几何函数不能用它的渐近表达式代替: 函数 $F$ 的宗量不是 $pr$,而是 $pr(1-\cos\theta)$,我们不能假定它是一个很大的量①.

在应用中,当 $\psi$ 具有不同于式(39.8)的旋量结构时,还需要下面的近似[式(39.8) 中的旋量结构可以化为因子 $u_{\varepsilon p}$]. 为了计算这个近似,我们把 $\psi$ 写成

$$\psi=\frac{C}{\sqrt{2\varepsilon}}e^{i\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{r}}\ (u_{\varepsilon p}F+\varphi).$$

在方程(39.4)的右边只保留 $U$ 的线性项,就得到函数 $\varphi$ 的方程

$$(\Delta+2i\boldsymbol{p}\cdot\nabla-2\varepsilon U)\varphi=-iu_{\varepsilon p}\boldsymbol{\alpha}\cdot\nabla U. \tag{39.9}$$

为了求出它的解,请注意,函数 $F$ 满足方程

$$(\Delta+2i\boldsymbol{p}\cdot\nabla-2\varepsilon U)F=0$$

[将式(39.6)代入(39.5)即可证实]. 对这个方程应用算符 $\nabla$, 我们得到

$$(\Delta+2i\boldsymbol{p}\cdot\nabla-2\varepsilon U)\nabla F=2\varepsilon F\nabla U.$$

---

① 在第三卷 § 135 中, 我们关心的是任意大的 $r$,因此,这样的代换对任意角度 $\theta$ 都是可能的.

再与方程(39.9)比较，我们求出

$$\varphi=-\frac{\mathrm{i}}{2\varepsilon}(\boldsymbol{\alpha}\cdot\nabla)u_{\varepsilon\boldsymbol{p}}F.$$

$\psi^{(+)}$及其类似的函数 $\psi^{(-)}$(它的渐近表达式中包含一个向内的球面波)的最后表达式是

$$\psi^{(+)}_{\varepsilon\boldsymbol{p}}=\frac{C}{\sqrt{2\varepsilon}}\mathrm{e}^{i\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{r}}\left(1-\frac{\mathrm{i}\boldsymbol{\alpha}}{2\varepsilon}\cdot\nabla\right)F[\mathrm{i}Z\alpha,1,\mathrm{i}(pr-\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{r})]u_{\varepsilon\boldsymbol{p}}$$

$$\psi^{(-)}_{\varepsilon\boldsymbol{p}}=\frac{C^*}{\sqrt{2\varepsilon}}\mathrm{e}^{i\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{r}}\left(1-\frac{\mathrm{i}\boldsymbol{\alpha}}{2\varepsilon}\cdot\nabla\right)F[-\mathrm{i}Z\alpha,1,-\mathrm{i}(pr+\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{r})]u_{\varepsilon\boldsymbol{p}},$$

**(39.10)**

$$C=\mathrm{e}^{\pi Z\alpha/2}\Gamma(1-\mathrm{i}Z\alpha)$$

(W. H. Furry, 1934). 我们还要写出具有“负频率”的类似函数($\psi_{-\varepsilon,-\boldsymbol{p}}$)，当研究有正电子参加的过程时就需要这样的函数. 这可以由在函数 $\psi_{\varepsilon\boldsymbol{p}}$ 中作代换 $\boldsymbol{p}\to-\boldsymbol{p}$, $\varepsilon\to-\varepsilon$ 得到，而 $p=|\boldsymbol{p}|$ 并不改变[因此，从原始表达式(39.6)可以看出，超几何函数的参数 $\mathrm{i}Z\alpha$ 改变符号；在(39.6)中，这个参数以 $\mathrm{i}Z\alpha\varepsilon/p$ 的形式出现]. 于是，我们得到

$$\psi^{(+)}_{-\varepsilon,-\boldsymbol{p}}=\frac{C}{\sqrt{2\varepsilon}}\mathrm{e}^{-i\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{r}}\left(1+\frac{\mathrm{i}\boldsymbol{\alpha}}{2\varepsilon}\cdot\nabla\right)F[-\mathrm{i}Z\alpha,1,\mathrm{i}(pr+\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{r})]u_{-\varepsilon,-\boldsymbol{p}},$$

$$\psi^{(-)}_{-\varepsilon,-\boldsymbol{p}}=\frac{C^*}{\sqrt{2\varepsilon}}\mathrm{e}^{-i\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{r}}\left(1+\frac{\mathrm{i}\boldsymbol{\alpha}}{2\varepsilon}\cdot\nabla\right)F[\mathrm{i}Z\alpha,1,-\mathrm{i}(pr-\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{r})]u_{-\varepsilon,-\boldsymbol{p}},$$

**(39.11)**

$$C=\mathrm{e}^{-\pi Z\alpha/2}\Gamma(1+\mathrm{i}Z\alpha).$$

对上面的计算还必须做如下说明. 对于单值地选择波动方程的解，我们的渐近条件本身是绝对不够的(这很显然，因为我们总可以给 $\psi$ 附加任一个向外的库仑球面波而不违反这个条件). 把方程(39.5)的解写成(39.6)的形式就不言而喻地满足了这样的要

求：解在 $r=0$ 时是有限的．这样的要求在第三卷 § 135, § 136 中是必须的．在那里，所研究的是对整个空间都正确的精确薛定谔方程的解[①]．而现在，方程(39.5)只对大距离成立，因而解的选择需要进一步的说明．

这可由如下事实给出：大的"碰撞参数"$\rho=r\sin\theta$ 对应着大的轨道角动量 $l$ 和小的散射角 $\theta$：当 $\rho\sim 1/m$ 时我们有

$$l\sim\rho p\sim\rho\varepsilon\sim\frac{\varepsilon}{m}\gg 1,$$

角度 $\theta$ 可以用准经典方法估计：

$$\theta\sim\frac{1}{p}\int\frac{\mathrm{d}U}{\mathrm{d}r}\mathrm{d}t\sim\frac{U'(\rho)\rho}{p}\sim\frac{m}{\varepsilon}\ll 1.$$

这就是说，在 $\psi$ 的球面波展开式中，在所研究的 $r$ 和 $\theta$ 范围内所出现的主要成分是上述较大 $l$ 值的波．但是具有较大 $l$ 值的球面波在坐标原点附近"经典不可到达的"距离 $r\ll l/\varepsilon$（由于离心势垒）上迅速衰减到很小值．因此，如果要在 $r\sim r_1$ $(l/\varepsilon\gg r_1\gg Z\alpha/\varepsilon)$ 的小距离上把方程(39.5)的解与精确方程(39.4)的解"接合"在一起，那么方程(39.5)的解的边界条件将要求它很小，所以我们的选择是正确的．

## 习　题

对 $Z\alpha\ll 1$ 的引力库仑场求非相对论分立谱波函数的修正（相对级数为 $\sim Z\alpha$）．

**解**　电子在束缚态的速度 $v\sim Z\alpha$，因而当 $Z\alpha\ll 1$ 时，零级近似波函数是非相对论的，即

$$\psi=u\psi_{非相},$$

这里 $\psi_{非相}$ 是满足非相对论性薛定谔方程的函数，$u$ 是双旋量：$u=\begin{pmatrix}w\\0\end{pmatrix}$，式中 $w$

---

① 在第三卷 § 135 的求解过程中，这个条件由于选择(135.1)那样的特解而得到保证，而不是不同的 $\beta_1$、$\beta_2$ 值的积分的总和．

是描述电子极化态的旋量. 在一级近似中我们写出 $\psi=u\psi_{非相}+\psi^{(1)}$并代人(39.4), 求出 $\psi^{(1)}$的方程

$$\left(\frac{1}{2m}\Delta-|\varepsilon_n|+\frac{Z\alpha}{r}\right)\psi^{(1)}=\mathrm{i}\frac{Z\alpha}{2m}\left(\nabla\frac{1}{r}\right)(\boldsymbol{\alpha}u)\psi_{非相},$$

式中 $\varepsilon_n$ 为非相对论分立谱能级. 这里略去了相对级数为$\sim(Z\alpha)^2$的项(在非相对论情形中基本距离具有玻尔半径的数量级: $r\sim1/mZ\alpha$). 这个方程的解为 $\psi^{(1)}=-\frac{i}{2m}\boldsymbol{\alpha}u\cdot\nabla\psi_{非相}$, 因而

$$\psi=\left(1-\frac{i}{2m}\boldsymbol{\alpha}\cdot\nabla\right)u\psi_{非相}.$$

## §40. 平面电磁波场中的电子

对于在平面电磁波场中运动的电子，狄拉克方程可以精确求解(Д. М. Волков, 1937).

四维波矢量为 $k(k^2=0)$ 的平面波场对四维坐标的依赖关系仅仅在于 $\varphi=kx$, 因而四维势为

$$A^\mu=A^\mu(\varphi), \tag{40.1}$$

它满足洛伦兹规范条件

$$\partial_\mu A^\mu=k_\mu A^{\mu\prime}=0$$

(撇号表示对 $\varphi$ 微分). 由于 $A$ 中的常数项无关紧要, 在这个条件中可以略去撇号而写成

$$kA=0. \tag{40.2}$$

我们以二阶方程(32.6)为出发点; 在(32.6)中, 场张量为

$$F_{\mu\nu}=k_\mu A'_\nu-k_\nu A'_\mu. \tag{40.3}$$

当展开$(\mathrm{i}\partial-eA)^2$时必须考虑到: 由于(40.2), $\partial_\mu(A^\mu\psi)=A^\mu\partial_\mu\psi$. 结果, 我们得到方程

$$[-\partial^2-2\mathrm{i}e(A\partial)+e^2A^2-m^2-\mathrm{i}e(\gamma k)(\gamma A')]\psi=0, \tag{40.4}$$

式中 $\partial^2=\partial_\mu\partial^\mu$.

我们来求这个方程如下形式的解:

$$\psi = e^{-ipx}F(\varphi), \tag{40.5}$$

式中 $p$ 为四维常矢量. 给 $p$ 附加一个 $k$ 的常数倍的任何矢量，都不会改变函数 $\psi$ 的这种形式[只要求把函数 $F(\varphi)$ 做适当改写]. 因此我们可以给 $p$ 附加一个补充条件而不丧失其普遍性. 令

$$p^2 = m^2. \tag{40.6}$$

这时如果取消外场，量子数 $p^\mu$ 就变成自由粒子四维动量的分量. 当有外场存在时，如果选择 $A_0=0$ 的特殊参考系，四维矢量 $p$ 的分量的意义就变得更加清楚. 设矢量 $\mathbf{A}$ 在这个参考系中指向 $x^1$ 轴，而 $\mathbf{k}$ 指向 $x^3$ 轴(即波的电场沿 $x^1$ 指向，磁场沿 $x^2$ 指向，波自身沿 $x^3$ 传播). 这时式(40.5)将是算符

$$\hat{p}_1 = i\frac{\partial}{\partial x^1}, \quad \hat{p}_2 = i\frac{\partial}{\partial x^2}, \quad \hat{p}_0 - \hat{p}_3 = i\left(\frac{\partial}{\partial x^0} - \frac{\partial}{\partial x^3}\right)$$

的本征函数，本征值分别是 $p_1, p_2, p_0-p_3$(不难看出，这些算符本身与狄拉克方程的哈密顿算符对易). 由此可见，在该参考系中 $p^1$, $p^2$ 分别是沿 $x^1, x^2$ 轴的广义动量的分量，而 $p^0-p^3$ 是总能量和 $x^3$ 轴上的广义动量分量之差.

将(40.5)代入(40.4)，注意到

$$\partial^\mu F = k^\mu F', \quad \partial_\mu \partial^\mu F = k^2 F'' = 0,$$

我们求出 $F(\varphi)$ 的方程

$$2i(kp)F' + [-2e(pA) + e^2A^2 - ie(\gamma k)(\gamma A')]F = 0.$$

这个方程的形式解为

$$F = \exp\left\{-i\int_0^{kx}\left[\frac{e}{kp}(pA) - \frac{e^2}{2(kp)}A^2\right]d\varphi + \frac{e(\gamma k)(\gamma A)}{2(kp)}\right\}\frac{u}{\sqrt{2p_0}},$$

式中 $u/\sqrt{2p_0}$ 是任意的恒定双旋量 (把它写成这个形式的原因见后).

由于

$$(\gamma k)(\gamma A)(\gamma k)(\gamma A) =$$

$$= -(\gamma k)(\gamma k)(\gamma A)(\gamma A)+2(kA)(\gamma k)(\gamma A)$$
$$= -k^2A^2=0,$$

因而，$(\gamma k)(\gamma A)$高于一级的所有次幂都等于零．这样，我们可以进行替换

$$\exp\frac{e(\gamma k)(\gamma A)}{2(kp)}=1+\frac{e}{2(kp)}(\gamma k)(\gamma A),$$

因而$\psi$的形式是

$$\psi_p=\left[1+\frac{e}{2(pk)}(\gamma k)(\gamma A)\right]\frac{u}{\sqrt{2p_0}}e^{iS}, \qquad (40.7)$$

式中①

$$S=-px-\int_0^{kx}\frac{e}{(kp)}\left[(pA)-\frac{e}{2}A^2\right]d\varphi. \qquad (40.8)$$

为了确定恒定双旋量$u$应满足的条件，应该认为波是由$t=-\infty$时无限缓慢地"引入"的．当$kx\to-\infty$时，$A\to0$，而$\psi$应该变成自由狄拉克方程的解．因此，$u=u(p)$应该满足方程

$$(\gamma p-m)u=0. \qquad (40.9)$$

这个条件排除了二阶方程的"多余"解．因为$u$不依赖于时间，这个条件对于有限的$kx$仍然有效．所以，$u(p)$与自由平面波的双旋量振幅一样；我们将按同样的条件(23.4)—$\bar{u}u=2m$使其归一化．

上述讨论也直接表明波函数(40.7)的归一化．无限缓慢地引入场并不改变归一化积分．由此得出，函数(40.7)满足与自由平面波相同的归一化条件

$$\int\psi^*_{p'}\psi_p d^3x=\int\bar{\psi}_{p'}\gamma^0\psi_p d^3x=(2\pi)^3\delta(\boldsymbol{p}'-\boldsymbol{p}). \qquad (40.10)$$

我们来求函数(40.7)所对应的流密度．注意到

$$\bar{\psi}_p=\frac{\bar{u}}{\sqrt{2p_0}}\left[1+\frac{e}{2(pk)}(\gamma A)(\gamma k)\right]e^{iS},$$

① $S$的表达式与在波场中运动的粒子的经典作用量相同．请比较第二卷§47，习题2.

由直接相乘，我们得到

$$j^\mu=\bar{\psi}_p\gamma^\mu\psi_p=\frac{1}{p_0}\left\{p^\mu-eA^\mu+k^\mu\left(\frac{e(pA)}{(kp)}-\frac{e^2A^2}{2(kp)}\right)\right\}.\quad(40.11)$$

如果 $A^\mu$ 是周期函数，它们对时间的平均值为零，则流密度的平均值

$$\bar{j}^\mu=\frac{1}{p_0}\left(p^\mu-\frac{e^2}{2(kp)}\bar{A}^2k^\mu\right).\quad(40.12)$$

我们也可以求出状态 $\psi_p$ 中的动力学动量密度．动力学动量算符为 $\hat{p}-eA=\mathrm{i}\partial-eA$．直接计算给出

$$\psi_p^*(\hat{p}^\mu-eA^\mu)\psi_p=\bar{\psi}_p\gamma^0(\hat{p}^\mu-eA^\mu)\psi_p=$$

$$=p^\mu-eA^\mu+k^\mu\left(\frac{e(pA)}{(kp)}-\frac{e^2A^2}{2(kp)}\right)+k^\mu\frac{\mathrm{i}e}{8(kp)p_0}F_{\lambda\nu}(u^*\sigma^{\lambda\nu}u).$$

$$(40.13)$$

用 $q^\mu$ 表示这个四维矢量对时间的平均值，则有

$$q^\mu=p^\mu-\frac{e^2\bar{A}^2}{2(kp)}k^\mu.\quad(40.14)$$

它的平方是

$$q^2=m_*^2,\quad m_*=m\sqrt{1-\frac{e^2}{m^2}\bar{A}^2},\quad(40.15)$$

$m_*$ 起着电子在场中的"有效质量"的作用．比较式（40.14）和（40.12），我们看到，

$$\bar{j}^\mu=\frac{q^\mu}{p_0}.\quad(40.16)$$

我们还看到，用矢量 $q$ 表示的归一化条件（40.10）的形式为

$$\int\psi_{p'}^*\psi_p d^3x=(2\pi)^3\frac{q_0}{p_0}\delta(\boldsymbol{q}'-\boldsymbol{q})\quad(40.17)$$

[由式（40.10）过渡到（40.17）的最简单方法，是在上面所指出的特殊参考系中进行]．

## § 41. 外场中的自旋运动

狄拉克方程中的准经典近似也可以像在非相对论理论中那样得到．在式(32.7a)的二阶方程中代入①

$$\psi = u e^{iS/\hbar},$$

式中 $S$ 是标量，$u$ 是缓慢变化的双旋量．这时假定通常的准经典性条件被满足：粒子的动量在大约等于波长 $\hbar/|\boldsymbol{p}|$ 的距离上变化很小．

在相对于 $\hbar$ 的零级近似中，对作用量 $S$ 我们得到通常的经典相对论的哈密顿-雅可比方程．这时，运动方程中没有包含自旋(且正比于 $\hbar$)的项，自旋只出现在相对于 $\hbar$ 的下一级近似中．换句话说，电子的磁矩对其运动的影响总是具有量子修正的数量级．由于自旋角动量与 $\hbar$ 成正比，具有纯粹的量子性质，因此，上述结论就是很自然的．

因此，当电子在外场中做已知的准经典运动时，提出电子自旋的行为问题是有意义的．这个问题的解包含在狄拉克方程相对于 $\hbar$ 的下一级近似中．不过，我们将采取另一种与狄拉克方程没有直接联系却更为直观的方法．这种方法的优点是可以处理任何粒子的运动，包括不能用狄拉克方程描述的具有"反常"迴转磁比率的粒子．

我们的目的是建立粒子做任意已知运动时的自旋的"运动方程"．让我们从非相对论情形开始．

粒子在外场中的非相对论哈密顿算符是

$$\hat{H} = \hat{H}' - \mu \boldsymbol{\sigma} \cdot \boldsymbol{H}, \tag{41.1}$$

这里的 $\hat{H}'$ 包括所有不含自旋的项(参看第三卷 § 111)，$\mu$ 为粒子的磁矩．这种形式的哈密顿算符适用于任何种类的粒子．对于电

① 开头使用通常的单位制．

子，$\mu=e\hbar/2mc$（电子的电荷为 $e=-|e|$），对于核子，$\mu$ 还包含"反常"部分①

$$\mu'=\mu-\frac{e\hbar}{2mc}. \tag{41.2}$$

按照量子力学的一般法则，自旋运动的算符方程可以由公式

$$\dot{\hat{\mathbf{s}}}=\frac{i}{\hbar}(\hat{H}\hat{\mathbf{s}}-\hat{\mathbf{s}}\hat{H})=\frac{i}{2\hbar}(\hat{H}\boldsymbol{\sigma}-\boldsymbol{\sigma}\hat{H}) \tag{41.3}$$

得到. 将式(41.1)代入此式，我们得到

$$\dot{\hat{s}}_i=-\frac{i\mu}{2\hbar}H_k(\sigma_k\sigma_i-\sigma_i\sigma_k)=-\frac{\mu}{\hbar}e_{ikl}H_k\sigma_l,$$

或

$$\dot{\hat{\mathbf{s}}}=\frac{2\mu}{\hbar}\hat{\mathbf{s}}\times\boldsymbol{H}. \tag{41.4}$$

我们来对这个算符等式在准经典波包状态中求平均，波包的运动轨道是已知的. 这个运算归结为自旋算符用它的平均值 $\bar{\mathbf{s}}$ 代替，矢量 $\boldsymbol{H}$ 用函数 $\boldsymbol{H}(t)$ 代替；$\boldsymbol{H}(t)$ 是粒子(波包)沿着轨道运动时其所在点上变化着的磁场. 在非相对论近似中，即在泡利方程的范围内，$\bar{\mathbf{s}}=\boldsymbol{\sigma}/2$ 是粒子在其静止参考系中的自旋算符，其平均值在 § 29 中我们用 $\zeta/2$ 表示. 因此，我们得到方程

$$\frac{d\zeta}{dt}=\frac{2\mu}{\hbar}[\zeta\boldsymbol{H}(t)]. \tag{41.5}$$

方程的这种形式本质上是纯经典性质的，它意味着磁矩矢量围绕场的方向以角速度 $-2\mu\boldsymbol{H}/\hbar$ 旋进，而大小保持不变②.

---

① 当考虑辐射修正时，电子磁矩中也包含很小的"反常部分".

② 经典方程(41.5)可以由等式

$$\frac{d\boldsymbol{M}}{dt}=\boldsymbol{\mu}\times\boldsymbol{H}$$

直接得到，式中的 $\boldsymbol{M}$ 是系统的角动量，$\boldsymbol{\mu}$ 是它的磁矩，$\boldsymbol{\mu}\times\boldsymbol{H}$ 是作用在系统上的力矩. 设 $\boldsymbol{M}=\frac{1}{2}\hbar\zeta$，$\boldsymbol{\mu}=\frac{\mu}{2s}\zeta=\mu\zeta$，我们便得出(41.5).

同样，在非相对论情形下，粒子的速度 $\boldsymbol{v}$ 按照方程

$$\frac{d\boldsymbol{v}}{dt}=\frac{e}{mc}[\boldsymbol{v}\times\boldsymbol{H}]$$

改变，即矢量 $\boldsymbol{v}$ 围绕 $\boldsymbol{H}$ 方向以角速度 $-e\boldsymbol{H}/mc$ 转动. 如果 $\mu'=0$，则 $\mu=e\hbar/2mc$，这个角速度和矢量 $\zeta$ 的转动速度 $-2\mu\boldsymbol{H}/\hbar$ 相同，换句话说，极化矢量和运动方向保持恒定的角度（下面我们将看到，这个结果在相对论情形下仍然有效）.

现在我们对方程(41.5)做相对论推广. 为了对极化进行协变描述，必须利用 § 29 中引入的四维矢量 $a$，而自旋的运动方程将决定它对固有时 $\tau$ 的微商 $\frac{\mathrm{d}a}{\mathrm{d}\tau}$[①].

从相对论协变性考虑，可以确定这个方程的可能形式：它的右边应该是电磁场张量 $F^{\mu\nu}$ 和四维矢量 $a^\mu$ 的线性齐次式，此外，可能只含四维速度 $u^\mu=p^\mu/m$. 满足这些条件的方程的唯一形式是

$$\frac{\mathrm{d}a^\mu}{\mathrm{d}\tau}=\alpha F^{\mu\nu}a_\nu+\beta u^\mu F^{\nu\lambda}u_\nu a_\lambda, \tag{41.6}$$

式中 $\alpha$，$\beta$ 为常系数. 不难看出，由于条件 $a_\mu u^\mu=0$ 和张量 $F^{\mu\nu}$ 的反对称性（因而 $F^{\mu\nu}u_\mu u_\nu=0$），不可能构造出别的表达式使其具有所要求的性质.

当 $v\to0$ 时，这个方程应该与式(41.5)相同. 设 $a^\mu=(0,\ \zeta)$，$u^\mu=(1,0)$，$\tau=t$，我们得到

$$\frac{\mathrm{d}\boldsymbol{\zeta}}{dt}=\alpha[\boldsymbol{\zeta}\times\boldsymbol{H}].$$

和式(41.5)比较，我们求出：$\alpha=2\mu$.

为了确定 $\beta$，我们应用 $a^\mu u_\mu=0$. 将这个等式对 $\tau$ 微分，利用电荷在场中的经典运动方程

① 下面重又假设 $c=1,\hbar=1$.

$$m\frac{\mathrm{d}u^\mu}{\mathrm{d}\tau}=eF^{\mu\nu}u_\nu$$

(参看第二卷，§ 23)，我们得到

$$u_\mu\frac{\mathrm{d}a^\mu}{\mathrm{d}\tau}=-a_\mu\frac{\mathrm{d}u^\mu}{\mathrm{d}\tau}=-a_\mu\frac{e}{m}F^{\mu\nu}u_\nu=\frac{e}{m}F^{\mu\nu}u_\mu a_\nu.$$

所以，方程(41. 6)两端乘以 $u_\mu$，考虑到等式 $u_\mu u^\mu=1$，并消去公共因子 $F^{\mu\nu}u_\mu a_\nu$，我们得到

$$\beta=-2\left(\mu-\frac{e}{2m}\right)=-2\mu'.$$

由此可见，自旋的相对论运动方程是

$$\frac{\mathrm{d}a^\mu}{\mathrm{d}\tau}=2\mu F^{\mu\nu}a_\nu-2\mu' u^\mu F^{\nu\lambda}u_\nu a_\lambda \tag{41. 7}$$

(V. Bargmann, L. Michel, Telegdi, 1959)①.

我们可以由四维矢量 $a$ 过渡到量 $\boldsymbol{\zeta}$，它直接表征粒子在其"瞬时"静止参考系中的极化；$a$ 和 $\boldsymbol{\zeta}$ 之间的关系由公式(29.7)—(29. 9)给出．首先我们看到，由式(41. 7)必定能够得出 $a_\mu \mathrm{d}a^\mu/\mathrm{d}\tau=0$，因而 $a_\mu a^\mu=\mathrm{const}$．由于 $a_\mu a^\mu=-\boldsymbol{\zeta}^2$，所以，这意味着粒子运动时，它的极化 $\boldsymbol{\zeta}$ 在大小上保持不变.

可以利用式(41. 7)中的三维部分得到决定极化方向变化的方程．展开这个方程的空间分量，我们求出

$$\frac{\mathrm{d}\boldsymbol{a}}{\mathrm{d}t}=\frac{2\mu m}{\varepsilon}\boldsymbol{a}\times\boldsymbol{H}+\frac{2\mu m}{\varepsilon}(\boldsymbol{a}\cdot\boldsymbol{v})\boldsymbol{E}-\frac{2\mu'\varepsilon}{m}\boldsymbol{v}(\boldsymbol{a}\cdot\boldsymbol{E})+$$
$$+\frac{2\mu'\varepsilon}{m}\boldsymbol{v}[\boldsymbol{v}\cdot(\boldsymbol{a}\times\boldsymbol{H})]+\frac{2\mu'\varepsilon}{m}\boldsymbol{v}(\boldsymbol{a}\cdot\boldsymbol{v})(\boldsymbol{v}\cdot\boldsymbol{E}).$$

这里必须代入式(29. 9)，微分 $\boldsymbol{p}=\varepsilon\boldsymbol{v}$ 时要考虑到 $\varepsilon^2=\boldsymbol{p}^2+m^2$ 和运动方程

$$\frac{\mathrm{d}\boldsymbol{p}}{\mathrm{d}t}=e\boldsymbol{E}+e\boldsymbol{v}\times\boldsymbol{H},\quad \frac{\mathrm{d}\varepsilon}{\mathrm{d}t}=e(\boldsymbol{v}\cdot\boldsymbol{E}). \tag{41. 8}$$

---

① 这个方程的另一种形式是 Я. И. Френкель 首先导出的(1926).

经过一些冗长的但却是初等的运算，得到方程①

$$\frac{d\zeta}{dt}=\frac{2\mu m+2\mu'(\varepsilon-m)}{\varepsilon}\boldsymbol{\zeta}\times\boldsymbol{H}+\frac{2\mu'\varepsilon}{\varepsilon+m}(\boldsymbol{v}\cdot\boldsymbol{H})(\boldsymbol{v}\times\boldsymbol{\zeta})$$

$$+\frac{2\mu m+2\mu'\varepsilon}{\varepsilon+m}[\boldsymbol{\zeta}\times(\boldsymbol{E}\times\boldsymbol{v})] \tag{41.9}$$

更有意义的不是极化方向的空间绝对位置变化，而是它相对于运动方向的变化．将 $\zeta$ 写成

$$\boldsymbol{\zeta}=\boldsymbol{n}\zeta_{/\!/}+\boldsymbol{\zeta}_{\perp} \tag{41.10}$$

(式中 $\boldsymbol{n}=\boldsymbol{v}/v$)，并突出极化在运动方向上的分量 $\zeta_{/\!/}$ 的方程．利用式(41.8)和(41.9)进行计算，可以得出如下结果②:

$$\frac{d\zeta_{/\!/}}{dt}=2\mu'[\boldsymbol{\zeta}_{\perp}\cdot(\boldsymbol{H}\times\boldsymbol{n})]+\frac{2}{v}\left(\frac{\mu m^2}{\varepsilon^2}-\mu'\right)(\boldsymbol{\zeta}_{\perp}\cdot\boldsymbol{E}). \tag{41.11}$$

在本节末的习题中给出了应用上述公式的几个例子．在这里我们仅仅指出，在纯粹磁场中运动时，无反常磁矩的粒子的极化与速度保持恒定角度 ($\zeta_{/\!/}=\text{const}$)．这个结果在上面已对非相对论情形指出过，实际上它具有普遍性．

我们可以更为明确地阐述一下上述方程的应用条件．起初所提到的粒子动量变化非常缓慢，这一要求等效于场量 $\boldsymbol{E}$ 和 $\boldsymbol{H}$ 应该很小，特别是，磁场中的拉摩半径($\sim p/eH$)与粒子的波长相比应该很大．然而，严格说来，除此以外还应该满足一个条件：场在空间上的改变不能太快，即在准经典波包的范围内场的改变应该很小．也就是说，在数量级为粒子波长($1/p$) 和康普顿波长 $1/m$

① 如果像通常所做的那样，按照 $\mu=g\frac{e}{2m}\frac{1}{2}\left(=g\frac{e}{2mc}\frac{\hbar}{2}\right)$，引入带电粒子的回磁比(朗德因子)，这个方程可以写成

$$\frac{d\zeta}{dt}=\frac{e}{2m}\left(g-2+2\frac{m}{\varepsilon}\right)(\boldsymbol{\zeta}\times\boldsymbol{H})+\frac{e}{2m}(g-2)\frac{\varepsilon}{\varepsilon+m}(\boldsymbol{v}\cdot\boldsymbol{H})(\boldsymbol{v}\times\boldsymbol{\zeta})$$

$$+\frac{e}{2m}\left(g-\frac{2\varepsilon}{\varepsilon+m}\right)[\boldsymbol{\zeta}\times(\boldsymbol{E}\times\boldsymbol{v})]. \tag{41.9a}$$

② 写出(41.7)的时间分量，就可较直接地得出此方程．

的距离上，场的改变应该很小①.

不过，在宏观场中运动的实际问题中，缓慢变化的条件显然能够满足，因而，事实上只要求它们非常小.

在§33中，我们求出了电子在外场中运动时的哈密顿量的第一级相对论修正. 对于在电场中运动的电子，近似哈密顿算符的形式为[参看(33.12)]:

$$\hat{H}=\hat{H}'-\frac{e}{4m}\left[\boldsymbol{\sigma}\cdot\left(\boldsymbol{E}\times\frac{\hat{\boldsymbol{p}}}{m}\right)\right],\quad(\hat{\boldsymbol{p}}=-i\Delta),\qquad(41.12)$$

这里 $\hat{H}'$ 中的项不含自旋. 现在，由于场变化缓慢，我们略去 $\hat{H}'$ 中 $\boldsymbol{E}$ 的微商项（即含 $\operatorname{div}\boldsymbol{E}$ 的项）. $\hat{\boldsymbol{p}}^4$ 的小项和我们要研究的场效应没有关系，也可以略去. 这样，当磁场不存在时，$\hat{H}'$ 化为非相对论性的哈密顿算符 $\hat{H}'=\hat{\boldsymbol{p}}^2/2m+e\Phi$.

公式(41.12)也可以由方程(41.9)导出而不必利用狄拉克方程，因而(在准经典情形下)它可以推广到具有反常磁矩的粒子.

精确到速度 $v$ 的一级项，电场中的自旋运动方程可以由写成如下形式的(41.9)得到:

$$\frac{d\boldsymbol{\zeta}}{dt}=(\mu+\mu')[\boldsymbol{\zeta}\times(\boldsymbol{E}\times\boldsymbol{v})]=\left(\frac{e}{2m}+2\mu'\right)[\boldsymbol{\zeta}\times(\boldsymbol{E}\times\boldsymbol{v})].$$

如果利用自旋算符与哈密顿算符的对易[按照式(41.3)]，要求从量子力学上得到这个方程，不难看出，我们必须假定

$$\hat{H}=\hat{H}'-\left(\mu'+\frac{e}{4m}\right)\left[\boldsymbol{\sigma}\cdot\left(\boldsymbol{E}\times\frac{\hat{\boldsymbol{p}}}{m}\right)\right].\qquad(41.13)$$

这就是所求的表达式. 当 $\mu'=0$ 时，我们回到式(41.12). 请注意，"正常"磁矩 $e/2m$ 比反常磁矩 $\mu'$ 多一个1/2因子②.

---

① 后一要求是因为在波包中(在它的静止参考系中)，速度的传播必定比 $c$ 小，否则，在这个参考系中就不能应用非相对论公式.

如果场变化太快，方程中就会出现不可忽视的附加项，其中包含场对坐标的微商.

② 这正是第147页注解中提到过的"托马斯1/2"，这里所阐述的推导过程明显地指出了它的来源.

## 习　题

1. 粒子在垂直于均匀磁场的平面内运动时($\boldsymbol{v}\perp\boldsymbol{H}$)，试确定其极化方向的改变.

**解**　方程(41.9)的右边只剩下第一项,所以矢量$\boldsymbol{\zeta}$以角速度

$$-\frac{2\mu m+2\mu'(\varepsilon-m)}{\varepsilon}\boldsymbol{H}=-\left(\frac{e}{\varepsilon}+2\mu'\right)\boldsymbol{H}$$

绕$\boldsymbol{H}$方向($z$轴)旋进. $\zeta$在$xy$平面上的投影(记做$\zeta_1$)在该平面内以同一角速度转动,而矢量$\boldsymbol{v}$以角速度$-e\boldsymbol{H}/\varepsilon$在同一平面内转动[这可从运动方程$\dot{\boldsymbol{p}}=\varepsilon\dot{\boldsymbol{v}}=e(\boldsymbol{v}\times\boldsymbol{H})$看出]. 由此可见,$\zeta_1$以角速度$-2\mu'\boldsymbol{H}$相对$\boldsymbol{v}$转动.

2. 同上题,但粒子在磁场方向上运动.

**解**　当$\boldsymbol{v}$和$\boldsymbol{H}$的方向一致时,方程(41.9)化为

$$\frac{d\boldsymbol{\zeta}}{dt}=\frac{2\mu m}{\varepsilon}(\boldsymbol{\zeta}\times\boldsymbol{H}),$$

即$\boldsymbol{\zeta}$绕$\boldsymbol{v}$和$\boldsymbol{H}$的共同方向以角速度$-2\mu m\boldsymbol{H}/\varepsilon$旋进.

3. 同上题,但粒子在均匀电场中运动.

**解**　设场$\boldsymbol{E}$沿$x$轴指向,而粒子在$xy$平面内运动(这时$p_y=\text{const}$). 由式(41.9)可见,矢量$\boldsymbol{\zeta}$以瞬时角速度

$$-\left(\frac{e}{\varepsilon+m}+2\mu'\right)E\frac{p_y}{\varepsilon}$$

绕$z$轴进动.

我们再把$\boldsymbol{\zeta}$分解成$\zeta_z$和(在$xy$平面内的)$\zeta_1$,这时

$$\zeta_z=\zeta_1\cos\varphi,\quad \zeta_\perp\cdot\boldsymbol{E}=-\zeta_1\sin\varphi\cdot\frac{v_y}{v}.$$

由式(41.11)我们求出,$\zeta_1$以瞬时角速度

$$\dot{\varphi}=\frac{2v_y}{v^2}\left(\frac{\mu m^2}{\varepsilon^2}-\mu'\right)=\frac{p_y}{\varepsilon}\left(\frac{em}{p^2}-2\mu'\right)$$

相对$\boldsymbol{v}$方向转动.

## §42. 中子在电场中的散射

中子与原子核碰撞时，大角度散射由主要的相互作用——核力决定,而对小角度散射,我们将会看到，中子的磁矩与原子核电

场的相互作用变得很重要(J. Schwinger, 1948).

我们将假设中子是非相对论的，因而所研究的相互作用可以用近似哈密顿算符(41.13)描述. 电中性粒子的所有磁矩都是“反常的”. 在这种情况下，算符 $\hat{H}'$ 就是动能算符①:

$$\hat{H}=-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta+i\frac{\mu\hbar}{mc}\boldsymbol{\sigma}\cdot(\boldsymbol{E}\times\nabla). \tag{42.1}$$

由于中子的电磁相互作用很小，由它决定的散射振幅 $f_{em}$ 可以用玻恩近似法计算:

$$f_{em}=-\frac{m}{2\pi\hbar^2}\int e^{-i\boldsymbol{p}'\cdot\boldsymbol{r}/\hbar}\left[i\frac{\mu\hbar}{mc}\boldsymbol{\sigma}\cdot(\boldsymbol{E}\times\nabla)\right]e^{i\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{r}/\hbar}d^3x$$

(参看第三卷 § 126)，或者

$$f_{em}=\frac{\mu}{2\pi c\hbar^2}\boldsymbol{\sigma}\cdot(\boldsymbol{E}_q\times\boldsymbol{p}),\ \boldsymbol{E}_q=\int\boldsymbol{E}(\boldsymbol{r})e^{-i\boldsymbol{q}\cdot\boldsymbol{r}}d^3x \tag{42.2}$$

($\boldsymbol{p}, \boldsymbol{p}'$ 分别是中子在散射前、后的动量; $\hbar\boldsymbol{q}=\boldsymbol{p}'-\boldsymbol{p}$). 写成这种形式的振幅 $f_{em}$ 是自旋变量的算符.

在进行下一步计算之前，我们做如下说明. 公式(42.1) 已经在 § 41 中对变化缓慢的场推导过了 (实际上意味着忽略了哈密顿算符中场的坐标微商项). 应用于原子核的库仑场，这意味着波长 $\hbar/p$ 应该比积分 $\boldsymbol{E}_q$ 中很重要的距离 $r\sim1/q$ 小. 由此，$\hbar q\ll p$, 因而，散射角 $\theta\sim\hbar q/p\ll1$. 由此可见，所要求的条件对小角度散射正好可以满足.

对于具有势 $\Phi=Ze/r$ 的库仑场来说，场强的傅里叶分量是

$$\boldsymbol{E}_q=-i\boldsymbol{q}\Phi_q=-i\boldsymbol{q}\frac{4\pi Ze}{q^2}$$

[参看第二卷(51.5)]. 代入式(42.2)，则有

$$f_{em}=i\frac{2Ze\mu}{q^2c\hbar^3}[\boldsymbol{\sigma}\cdot(\boldsymbol{p}\times\boldsymbol{p}')],$$

---

① 本节用通常的单位，字母 $m$ 代表中子的质量.

当散射角度很小时，$\hbar q \approx p\theta$，$\boldsymbol{p}\times\boldsymbol{p}'\approx p^2\theta\boldsymbol{\nu}$，这里 $\nu$ 是 $\boldsymbol{p}\times\boldsymbol{p}'$ 方向上的单位矢量. 所以

$$f_{em}=\mathrm{i}\frac{2Ze\mu}{\theta\hbar c}\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{\nu}.$$

这个表达式应该附加一个核散射振幅. 由于核力随距离衰减很快，这个振幅在角度很小时趋于一个有限的(与能量有关的) 复数值，我们用 $a$ 表示. 所以，总散射振幅

$$f=a+\mathrm{i}\frac{b}{\theta}\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{\nu},\qquad b=\frac{2Ze\mu}{c\hbar}=2Z\alpha\frac{\mu}{e}. \tag{42.3}$$

我们看到，当角度很小时，电磁散射是主要的.

表达式(42.3) 与第三卷 § 140 中所讨论的一致，因而我们可以直接应用在那里所推导出的公式. 对所有可能的极化终态求和的散射截面是

$$\frac{d\sigma}{do}=|a|^2+\frac{b^2}{\theta^2}+2b\,\mathrm{Im}\,a\cdot(\boldsymbol{\nu}\cdot\boldsymbol{\zeta}), \tag{42.4}$$

式中 $\xi$ 是中子束的初始极化 (第三卷 § 140 中的 $\boldsymbol{P}$). 如果初态是未极化的($\boldsymbol{\zeta}=0$)，则散射后的极化为

$$\boldsymbol{\zeta}'=\frac{2b\,\mathrm{Im}\,a\cdot\theta}{|a|^2\theta^2+b^2}\boldsymbol{\nu}. \tag{42.5}$$

当 $\theta=b/|a|$ 时，这个极化最大，并且 $\zeta'_{\max}=\mathrm{Im}\,a/|a|$.

# 第五章 辐 射

## §43. 电磁相互作用算符

电子与电磁场的相互作用通常可以用微扰论来处理．这是因为电磁相互作用比较弱．也就是说，相应的无量纲的“耦合常数”（即精细结构常数 $\alpha=1/137$）是个小量．这一点在量子电动力学中是非常重要的．

在经典电动力学中(参看第二卷 §28)，电磁相互作用可以用“场＋电荷”系统的拉格朗日密度函数中的一项

$$-ej^{\mu}A_{\mu} \tag{43.1}$$

来描述（$A$ 是场的四维势，$j$ 是粒子的四维流密度矢量)．流密度满足连续性方程

$$\partial_{\mu}j^{\mu}=0, \tag{43.2}$$

这是电荷守恒定律的表达．我们知道（参看第二卷 §29)，经典电磁理论的规范不变性正是与这个定律密切相关．实际上，当进行代换 $A_{\mu}\to A_{\mu}+\partial_{\mu}\chi$(4.1)时，拉格朗日密度函数(43.1) 中增加了一项 $-ej^{\mu}\partial_{\mu}\chi$，由于该项可以写成四维散度

$$-e\partial_{\mu}(\chi j^{\mu})$$

的形式[根据式(43.2)]，因此，作用量 $S=\int L\mathrm{d}^{4}x$ 中的积分自然使该项消失．

在量子电动力学中，四维矢量 $j$ 和 $A$ 由相应的二次量子化算符代替．这时，流算符按照 $\hat{j}=\hat{\bar{\psi}}\gamma\hat{\psi}$ 由 $\psi$ 算符表示．在拉格朗日算符

$$\int \hat{L}_{\text{相互}} \mathrm{d}^3x = -e\int (\hat{j}\hat{A})\mathrm{d}^3x$$

中起广义"坐标"$q$ 作用的是每个空间点上的 $\hat{\bar{\psi}}$、$\hat{\psi}$、$\hat{A}$ 值. 由于拉格朗日密度仅仅依赖于"坐标"$q$ 本身(而不是它们对 $x$ 的微商),因而,要按公式(10.11)得到哈密顿密度,只需改变拉格朗日密度的符号①. 由此可见,电磁相互作用算符(相互作用哈密顿密度的空间积分)的形式是

$$\hat{V} = e\int (\hat{j}\hat{A})\mathrm{d}^3x. \tag{43.3}$$

自由电磁场算符为

$$\hat{A} = \sum_n [\hat{c}_n A_n(x) + \hat{c}_n^+ A_n^*(x)], \tag{43.4}$$

它包含光子在各种状态(用指标 $n$ 表示)中的产生算符和湮灭算符,其中每个算符只对相应的占有数 $N_n$ 增加或减小 1(而其余占有数不变)有矩阵元. 所以,算符 $\hat{A}$ 只对光子数改变 1 的跃迁有矩阵元. 换句话说,在微扰论的第一级近似中,只有发射或吸收一个光子的过程才会发生.

根据式(2.15),矩阵元为

$$\langle N_n - 1|c_n|N_n\rangle = \langle N_n|c_n^+|N_n - 1\rangle = \sqrt{N_n}. \tag{43.5}$$

如果在场的初态中没有($n$ 型)光子,则$\langle 1|c_n^+|0\rangle = 1$. 对于光子发射来说,算符(43.3)的矩阵元为

$$V_{fi}(t) = e\int (j_{fi} A_n^*)\mathrm{d}^3x, \tag{43.6}$$

式中 $A_n(x)$ 是所发射光子的波函数,$j_{fi}$ 是辐射体从初态 $i$ 跃迁到终态 $f$ 的算符 $\hat{j}$ 的矩阵元②. 四维矢量 $j_{fi}^{\mu}(\rho_{fi}, \boldsymbol{j}_{fi})$ 叫**跃迁流**.

① 与这些讨论无关的一点是,如果只考虑一级小量修正,那么,拉格朗日量中的任一小修正都以相反的符号出现在哈密顿量中(参看第一卷 § 40).

② 式(43.6)的含义前后并不一样:$V_{fi}$ 的指标表示整个"辐射体+场"的状态,而 $j_{fi}$ 只指辐射体的状态.

类似地，可以得到光子吸收的矩阵元

$$V_{fi}(t)=e\int(j_{fi}A_n)\mathrm{d}^3x. \tag{43.7}$$

它和式(43.6)的区别仅仅是 $A_n(x)$ 代替了 $A_n^*(x)$.

指出 $V_{fi}(t)$ 的自变量 $t$ 是为了强调矩阵元是依赖于时间的. 分离出波函数中的时间因子，就可以求出不依赖于时间的矩阵元:

$$V_{fi}(t)=V_{fi}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}(E_i-E_f\mp\omega)t} \tag{43.8}$$

($E_i, E_f$ 是辐射系统的初态能量和终态能量，$\mp\omega$ 分别对应于发射和吸收一个光子 $\omega$).

具有一定动量 $\boldsymbol{k}$ 和一定极化的光子波函数为

$$A^\mu=\sqrt{4\pi}\,\frac{e^\mu}{\sqrt{2\omega}}\mathrm{e}^{\mathrm{i}\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}} \tag{43.9}$$

[参看式(4.3)，略去了时间因子]. 代入式(43.6)，我们求出发射这种光子的矩阵元

$$V_{fi}=e\sqrt{4\pi}\frac{1}{\sqrt{2\omega}}e_\mu^* j_{fi}^\mu(\boldsymbol{k}), \tag{43.10}$$

式中 $j_{fi}(\boldsymbol{k})$ 是动量表象中的跃迁流，即傅里叶分量

$$j_{fi}(\boldsymbol{k})=\int j_{fi}(\boldsymbol{r})\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}}\mathrm{d}^3x. \tag{43.11}$$

对于吸收光子，相应的公式是

$$V_{fi}=e\sqrt{4\pi}\frac{1}{\sqrt{2\omega}}e_\mu j_{fi}^\mu(-\boldsymbol{k}). \tag{43.12}$$

动量表象中的流守恒方程就是跃迁流的四维横向条件:

$$k_\mu j_{fi}^\mu=\omega\rho_{fi}(\boldsymbol{k})-\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{j}_{fi}(\boldsymbol{k})=0. \tag{43.13}$$

本节中的公式没有用流算符的具体形式，因而对任何带电粒子参加的电磁过程都普遍成立. 现有理论只能对电子确定其流算符的形式(因而原则上就能计算它的矩阵元). 对强相互作用粒子的系统(包括原子核)，我们将用半唯象理论，在这种理论中，跃迁流是从经验上确定的一个量，它只满足时-空对称性的一般要求

和连续性方程.

## §44. 发射和吸收

在微扰 $\hat{V}$ 作用下，跃迁几率的一级近似由熟知的微扰论公式给出(第三卷，§42). 设辐射系统的初态和终态属于分立谱①，这时，在单位时间里发射一个光子的跃迁 $i\to f$ 的几率是

$$dw=2\pi|V_{fi}|^2\delta(E_i-E_f-\omega)\mathrm{d}\nu, \tag{44.1}$$

式中 $\nu$ 取一系列连续值，是描述光子状态的量的集合(这时假设光子波函数归一化为"$\nu$ 标度"的 $\delta$ 函数).

如果所发射的光子具有一定的角动量，那么唯一的连续变量是频率 $\omega$. 公式(44.1)对 $\mathrm{d}\nu\equiv\mathrm{d}\omega$ 积分，消去了 $\delta$ 函数（$\omega$ 由 $E_i-E_f$ 代替)，则跃迁几率为

$$w=2\pi|V_{fi}|^2. \tag{44.2}$$

如果考虑发射的光子具有一定的动量 $\boldsymbol{k}$，那么 $\mathrm{d}\nu=\mathrm{d}^3k/(2\pi)^3=\omega^2\mathrm{d}\omega\mathrm{d}o/(2\pi)^3$. 本书中处处假定光子的波函数（平面波）归一化为"$V=1$ 的体积中有一个光子"；$\mathrm{d}\nu$是相体积$V\mathrm{d}^3k$ 中的状态数. 所以发射具有一定动量的光子的几率可以写成

$$\mathrm{d}w=2\pi|V_{fi}|^2\delta(E_i-E_f-\omega)\frac{\mathrm{d}^3k}{(2\pi)^3}, \tag{44.3}$$

或者对 $\mathrm{d}\omega$ 积分后，

$$\mathrm{d}w=\frac{1}{(4\pi)^2}|V_{fi}|^2\omega^2\mathrm{d}o. \tag{44.4}$$

由式(43.10)算出的矩阵元 $V_{fi}$ 必须代入此式.

下一节我们将利用这些公式计算各种具体情形中的发射几率. 在这里，我们研究一下各种辐射过程之间的几个普遍关系式.

如果场的初态中已经有 $N_n$ 个($N_n\neq0$)已知光子，则跃迁矩阵

① 这无疑意味着反冲被忽略：辐射体整体保持不动.

元还必须乘以

$$\langle N_n+1|C_n^+|N_n\rangle=\sqrt{N_n+1}, \tag{44.5}$$

即跃迁几率乘以$N_n+1$. 这个因子中的 1 对应着$N_n=0$时的自发辐射，而项 $N_n$ 描述受激(或感生)辐射：我们看到，在场的初态中存在的光子能够激励同种光子的进一步发射.

系统状态反向变化 ($f\to i$) 的跃迁 矩阵元 $V_{if}$ 与 $V_{fi}$ 的区别是以

$$\langle N_n-1|C_n|N_n\rangle=\sqrt{N_n}$$

代替式(44.5)，而其余各量由它们的复共轭代替. 这个相反的跃迁是系统吸收一个光子，由能级 $E_f$ 跃迁到能级 $E_i$. 所以，对于已知的两个状态 $i$、$f$ 来说，发射和吸收光子的几率之间有如下关系式①：

$$\frac{w_{\text{发射}}}{w_{\text{吸收}}}=\frac{N_n+1}{N_n}, \tag{44.6}$$

这个关系式是爱因斯坦在 1916 年首先导出的.

我们把光子数与入射在系统上的外来辐射强度联系起来. 设

$$I_{k\cdot e}\mathrm{d}\omega\mathrm{d}o \tag{44.7}$$

是 1 秒钟内入射在 1 $\mathrm{cm}^2$ 面积上的辐射能量，辐射的极化为 $e$，频率范围为 $\mathrm{d}\omega$，波矢量的方向在立体角元 $\mathrm{d}o$ 内. 这个范围对应着 $k^2dkdo/(2\pi)^3$ 个振子，每个振子上有 $N_{k\cdot e}$ 个已知极化的光子. 所以，和式(44.7)同样的能量可以由乘积

$$c\frac{k^2\mathrm{d}k\mathrm{d}o}{(2\pi)^3}N_{k\cdot e}\cdot\hbar\omega=\frac{\hbar\omega^3}{8\pi^3c^2}N_{k\cdot e}\mathrm{d}\omega\mathrm{d}o$$

给出. 由此我们找到所求的关系式

$$N_{k\cdot e}=\frac{8\pi^3c^2}{\hbar\omega^3}I_{k\cdot e}. \tag{44.8}$$

① 本节中以下采用通常的单位.

设 $dw_{k\cdot e}^{(自发)}$ 是在立体角 $do$ 内极化为 $e$ 的光子的自发辐射几率，而指标"受激"和"吸收"指示相应的受激辐射和吸收的几率. 按照式(44.6)和(44.8)，这些几率之间的关系式是

$$dw_{k\cdot e}^{(吸收)}=dw_{k\cdot e}^{(受激)}=dw_{k\cdot e}^{(自发)}\frac{8\pi^3c^2}{\hbar\omega^3}I_{k\cdot e}. \tag{44.9}$$

如果入射的辐射是各向同性的，而且是非极化的($I_{k\cdot e}$ 与 $k$ 和 $e$ 的方向无关)，则式(44.9)对 $do$ 积分并对 $e$ 求和给出（系统在已知状态 $i$ 和 $f$ 之间)辐射跃迁总几率之间的类似关系式

$$w^{(吸收)}=w^{(受激)}=w^{(自发)}\frac{\pi^2c^2}{\hbar\omega^3}I. \tag{44.10}$$

式中 $I=2\cdot 4\pi I_{k\cdot e}$ 为入射辐射的总谱强度.

如果辐射(或吸收)系统的状态 $i$ 和 $f$ 是简并的. 那么有关光子的辐射(或吸收)总几率可以通过对所有互相简并的终态求和并对所有可能的初态平均而得到. 如果状态 $i$ 和 $f$ 的简并度（统计权值)用 $g_i$ 和 $g_f$ 表示，那么，对于自发和受激的辐射过程来说，$i$ 状态是初态，而对于吸收过程来说，$f$ 状态是初态. 假设每一情形中 $g_i$ 或 $g_f$ 个初态的几率相等，显然，代替(44.10)，我们有如下关系式:

$$g_fw^{(吸收)}=g_iw^{(受激)}=g_iw^{(自发)}\frac{\pi^2c^2}{\hbar\omega^3}I. \tag{44.11}$$

在文献中常常用到所谓**爱因斯坦系数**，其定义为

$$A_{if}=w^{(自发)},\quad B_{if}=w^{(受激)}\frac{c}{I},\quad B_{fi}=w^{(吸收)}\frac{c}{I} \tag{44.12}$$

(量 $I/c$ 是辐射能量的空间谱密度)，它们之间的关系是

$$g_fB_{fi}=g_iB_{if}=g_iA_{if}\frac{\pi^2c^3}{\hbar\omega^3}. \tag{44.13}$$

## § 45. 偶极辐射

我们用上面得到的公式来研究相对论电子在已知外场中发射光子的情形. 在这种情况下,跃迁流是算符

$$\hat{j}=\hat{\bar{\psi}}\gamma\hat{\psi}$$

的矩阵元, 这里假定 $\psi$ 算符是按电子在给定场中的定态波函数展开的( § 32). 矩阵元$\langle 0_i 1_f|j|1_i 0_f\rangle$对应于电子由 $i$ 态到 $f$ 态的跃迁. 占有数的这种改变是通过算符 $\hat{a}_f^+\hat{a}_i$ 实现的. 跃迁流为

$$j_{fi}^{\mu}=\bar{\psi}_f\gamma^{\mu}\psi_i=(\psi_f^*\psi_i,\ \psi_f^*\boldsymbol{\alpha}\psi_i),\tag{45.1}$$

式中 $\psi_i$ 和 $\psi_f$ 是电子的初态和终态波函数.

我们在三维横向规范中来选择光子的波函数 [四维极化矢量 $e=(0,\boldsymbol{e})$]. 这时式(43.10)中的乘积 $j_{fi}e^*=-\boldsymbol{j}_{fi}\cdot\boldsymbol{e}^*$. 将 $V_{fi}$代入式(44.4),我们得到 1 秒钟内在立体角元 $\mathrm{d}o$ 内发射极化为 $\boldsymbol{e}$的光子的几率公式

$$\mathrm{d}w_{\boldsymbol{e}\cdot\boldsymbol{n}}=e^2\frac{\omega}{2\pi}|\boldsymbol{e}^*\cdot\boldsymbol{j}_{fi}(\boldsymbol{k})|^2\mathrm{d}o,\tag{45.2}$$

式中

$$\boldsymbol{j}_{fi}(\boldsymbol{k})=\int\psi_f^*\boldsymbol{\alpha}\psi_i\cdot\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}}\mathrm{d}^3x.\tag{45.3}$$

对光子的极化求和就是对方向 $\boldsymbol{e}$ 求平均 (在垂直于已知方向 $\boldsymbol{n}=\boldsymbol{k}/\omega$ 的平面内), 然后再乘以 2, 这是因为光子可以有两个独立的横向极化①. 于是我们得到公式

---

① 求平均时可以利用公式

$$\overline{e_ie_k^*}=\frac{1}{2}(\delta_{ik}-n_in_k)\tag{45.4a}$$

或 $$\overline{(\boldsymbol{a}\cdot\boldsymbol{e})(\boldsymbol{b}\cdot\boldsymbol{e}^*)}=\frac{1}{2}\{\boldsymbol{a}\cdot\boldsymbol{b}-(\boldsymbol{a}\cdot\boldsymbol{n})(\boldsymbol{b}\cdot\boldsymbol{n})\}=\frac{1}{2}(\boldsymbol{a}\times\boldsymbol{n})\cdot(\boldsymbol{b}\times\boldsymbol{n})\tag{45.4b}$$

式中的 $\boldsymbol{a},\boldsymbol{b}$ 为常矢量.

$$dw_n = e^2\frac{\omega}{2\pi}|\boldsymbol{n}\times\boldsymbol{j}_{fi}(\boldsymbol{k})|^2 do. \tag{45.4}$$

一种很重要的情形是：光子的波长 $\lambda$ 比辐射系统的线度 $a$ 大．这通常意味着粒子的速度比光速小．在 $a/\lambda$ 的一级近似中（对应着偶极辐射，比较第二卷 § 67），跃迁流(45.3) 中的因子 $e^{-i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}}$ 可以用 1 代替，因为在 $\psi_i$ 或 $\psi_f$ 明显不为零的区域内它仅有些微变化．这意味着光子的动量与系统中粒子的动量相比可以忽略．

在同样的近似中，积分 $\boldsymbol{j}_{fi}(0)$ 可以用它的非相对论表达式，即电子速度对薛定谔波函数的矩阵元 $\boldsymbol{v}_{fi}$ 来代替．同样，这个元素 $\boldsymbol{v}_{fi}=-i\omega\boldsymbol{r}_{fi}$，而 $e\boldsymbol{r}_{fi}=\boldsymbol{d}_{fi}$，这里 $\boldsymbol{d}$ 是电子(在它的轨道运动中)的偶极矩．这样，我们求出偶极辐射几率的公式

$$dw_{e\cdot n} = \frac{\omega^3}{2\pi}|\boldsymbol{e}^*\cdot\boldsymbol{d}_{fi}|^2 do \tag{45.5}$$

(这里暗含着方向 $\boldsymbol{n}$：矢量 $\boldsymbol{e}$ 应该垂直于 $\boldsymbol{n}$)．对极化求和后我们得到

$$dw_n = \frac{\omega^3}{2\pi}|\boldsymbol{n}\times\boldsymbol{d}_{fi}|^2 do. \tag{45.6}$$

由于这些公式对电子是非相对论性的，显然可以推广到任何电子系统，这时必须把 $\boldsymbol{d}_{fi}$ 看成系统总偶极矩的矩阵元．

公式(45.6)对所有方向积分，我们求出总辐射几率

$$w = \frac{4\omega^3}{3}|\boldsymbol{d}_{fi}|^2, \tag{45.7}$$

或者写成通常的单位，

$$w = \frac{4\omega^3}{3\hbar c^3}|\boldsymbol{d}_{fi}|^2. \tag{45.7a}$$

辐射强度 $I$ 由几率乘以 $\hbar\omega$ 得到：

$$I = \frac{4\omega^4}{3c^3}|\boldsymbol{d}_{fi}|^2. \tag{45.8}$$

这个公式直接类似于做周期性运动的粒子系统的经典偶极辐

射强度公式[参看第二卷(67.11)]：频率 $\omega_s=s\omega$($\omega$ 为粒子运动的频率，$s$ 为整数)的辐射强度等于

$$I_s=\frac{4\omega_s^4}{3c^3}|\boldsymbol{d}_s|^2, \tag{45.9}$$

式中 $\boldsymbol{d}_s$ 为偶极矩的傅里叶分量，即展开式

$$\boldsymbol{d}(t)=\sum_{s=-\infty}^{\infty}\boldsymbol{d}_s\mathrm{e}^{-\mathrm{i}s\omega t} \tag{45.10}$$

的系数. 用相应跃迁的矩阵元代替式(45.9)中的傅里叶分量，就得到量子公式(45.8). 这个法则(这是玻尔**对应原理**的表述)是经典量的傅里叶分量和准经典情形中的量子矩阵元之间一般对应关系的特殊情形(参看第三卷§48). 对于量子数很大的状态之间的跃迁，辐射是准经典的；这时跃迁能量 $\hbar\omega=E_i-E_f$ 比辐射体的能量 $E_i$ 和 $E_f$ 小. 但是这种情况不会使公式(45.8)有任何形式上的改变，(45.8)对任何跃迁都是正确的. 这就解释了下面的事实(在某种意义上多少有些偶然)：辐射强度的对应原理不仅在准经典情形中是正确的，而且在一般的量子情形中也是正确的.

## §46. 电多极辐射

现在，我们来研究角动量 $j$ 及其在某个选定方向 $z$ 上的分量 $m$ 具有确定值的光子的发射，而不是在已知方向上（即具有已知动量的)光子的发射. 在§6 中我们已经看到，这样的光子有两种类型——电型和磁型. 我们首先研究电型光子的发射，并仍然假定辐射系统的线度比波长小.

借助动量表象中的光子波函数（即将四维矢量 $A^\mu(\boldsymbol{r})$ 写成傅里叶积分的形式)进行计算比较方便. 这时，矩阵元为

$$V_{fi}=e\int j_{fi}^\mu(\boldsymbol{r})A_\mu^*(\boldsymbol{r})\mathrm{d}^3x=e\int\mathrm{d}^3x\cdot j_{fi}^\mu(\boldsymbol{r})\int\frac{d^3k}{(2\pi)^3}A_\mu^*(\boldsymbol{k})\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}} \tag{46.1}$$

(为了简化书写，我们略去光子波函数上的指标 $\omega jm$).

对于 $Ej$ 型光子，我们取式(7.10)的波函数，选任意常数 $C$ 等于

$$C=-\sqrt{\frac{j+1}{j}}.$$

这样选取，可使波函数($A$)的空间分量中含 $j-1$ 阶球函数的项能够消去[如公式(7.16)]. 这样，$\boldsymbol{A}$ 中将只含 $j+1$ 阶球函数，因而与含较低的 $j$ 阶球函数的分量 $A^0\equiv\Phi$ 相比，对 $V_{fi}$ 的贡献是 $a/\lambda$ 的较高阶小量(由以下计算可清楚看出).

因此，我们假设

$$A^\mu=(\Phi,0),\quad \Phi=-\sqrt{\frac{j+1}{j}}\frac{4\pi^2}{\omega^{3/2}}\delta(|\boldsymbol{k}|-\omega)Y_{jm}(\boldsymbol{n})$$

($\boldsymbol{n}=\boldsymbol{k}/\omega$). 将此式代入式(46.1)并对 $\mathrm{d}|\boldsymbol{k}|$ 积分，我们得到

$$V_{fi}=-e\sqrt{\frac{j+1}{j}}\frac{\sqrt{\omega}}{2\pi}\int\mathrm{d}^3x\cdot\rho_{fi}(\boldsymbol{r})\int\mathrm{d}o_n\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}}Y^*_{jm}(\boldsymbol{n}). \tag{46.2}$$

为了计算内积分，我们利用展开式(24.12)，写出

$$\mathrm{e}^{\mathrm{i}\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}}=4\pi\sum_{l=0}^{\infty}\sum_{m=-l}^{l}\mathrm{i}^l g_l(kr)Y^*_{lm}\left(\frac{\boldsymbol{k}}{k}\right)Y_{lm}\left(\frac{\boldsymbol{r}}{r}\right), \tag{46.3}$$

式中

$$g_l(kr)=\sqrt{\frac{\pi}{2kr}}J_{l+1/2}(kr) \tag{46.4}$$

[参看第三卷(34.3)]①. 把这个展开式代入式(46.2)，我们得到

$$\int\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}}Y^*_{jm}(\boldsymbol{n})\mathrm{d}o_n=4\pi\mathrm{i}^{-j}g_j(kr)Y^*_{jm}\left(\frac{\boldsymbol{r}}{r}\right)$$

---

① 函数 $g_l$ 的归一化是这样的：当 $kr\to\infty$ 时，它的渐近形式为

$$g_l(kr)\approx\frac{\sin(kr-\pi l/2)}{kr} \tag{46.4a}$$

(其余的项因球函数的正交性而为零)．由于条件 $a/\lambda\ll 1$，对 $d^3x$ 的积分中只有满足 $kr\ll 1$ 的距离起作用．因此，在函数 $g_j(kr)$ 展开为 $kr$ 的幂级数中，可以只取第一项

$$g_j(kr)\approx\frac{(kr)^j}{(2j+1)!!}. \tag{46.5}$$

来代替函数 $g_j(kr)$①．结果，我们得到

$$V_{fi}=(-1)^{m+1}\mathrm{i}^j\sqrt{\frac{(2j+1)(j+1)}{\pi j}}\frac{\omega^{j+1/2}}{(2j+1)!!}e(Q^{(电)}_{j,-m})_{fi}, \tag{46.6}$$

式中引入了记号

$$(Q^{(电)}_{jm})_{fi}=\sqrt{\frac{4\pi}{2j+1}}\int\rho_{fi}(\boldsymbol{r})r^jY_{jm}\left(\frac{\boldsymbol{r}}{r}\right)d^3x \tag{46.7}$$

[请记住，$Y_{j,-m}=(-1)^{j-m}Y^*_{jm}$]．与相应的经典量相类似（第二卷，§ 41)②，量(46.7)叫做系统的**电 $2^j$ 极跃迁矩**.

对于外场中的一个电子，$\rho_{fi}=\psi^*_f\psi_i$，量(46.7)是作为经典量

$$Q^{(电)}_{jm}=\sqrt{\frac{4\pi}{2j+1}}r^jY_{jm}$$

的矩阵元来计算的.

在非相对论情形中(对粒子速度而言)，对于$N$个相互作用粒子组成的任意系统，跃迁矩原则上可以按类似的方法计算．这时，跃迁密度通过系统的波函数

$$\rho_{fi}(\boldsymbol{r})=\int\psi^*_f(\boldsymbol{r}_1,\cdots,\boldsymbol{r}_N)\psi_i(\boldsymbol{r}_1,\cdots,\boldsymbol{r}_N)\sum_{n=1}^{N}\delta(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}_n)\cdot d^3x_1\cdots d^3x_N \tag{46.8}$$

① $kr$ 的幂次等于与 $g_j$ 相乘的函数 $Y_{jm}$ 的阶数．这样就证明了将 $\boldsymbol{A}$ 中含较高阶球函数的项忽略是正确的.

② 多极矩的定义中没有因子 $e$，这是由于本书的流定义中也没有电荷因子.

表达，积分对整个位形空间进行①.

我们在这里所用的光子波函数，同式(44.2)中一样，相应于(在坐标表象中)归一化为按 $\omega$ 标度的 $\delta$ 函数. 将式(46.6)代入，我们得到 $E_j$ 辐射的几率②

$$w_{jm}^{(电)}=\frac{2(2j+1)(j+1)}{j[(2j+1)!!]^2}\omega^{2j+1}e^2|(Q_{j,-m}^{(电)})_{fi}|^2. \qquad (46.9)$$

特别是当 $j=1$ 时，我们有

$$w_{1m}^{(电)}=\frac{4\omega^3}{3}e^2|(Q_{1,-m}^{(电)})_{fi}|^2. \qquad (46.10)$$

量 $Q_{1m}^{(电)}$ 与电偶极矩矢量的分量有下列关系:

$$eQ_{10}^{(电)}=\mathrm{i}d_z, \quad eQ_{1,\pm1}^{(电)}=\mp\frac{\mathrm{i}}{\sqrt{2}}(d_x\pm \mathrm{i}d_y). \qquad (46.11)$$

将式(46.10)对 $m$ 求和，就回到我们熟知的偶极辐射总几率的公式(45.7).

多极辐射的角分布由公式(7.11)决定. 将它归一化为总发射几率 $w_{jm}$ 时，我们有

$$\mathrm{d}w_{jm}=|\mathbf{Y}_{jm}^{(电)}(\boldsymbol{n})|^2w_{jm}\mathrm{d}o=\frac{w_{jm}}{j(j+1)}|\nabla_nY_{jm}|^2\mathrm{d}o. \qquad (46.12)$$

特别是当 $j=1$ 时，

$$Y_{10}=\mathrm{i}\sqrt{\frac{3}{4\pi}}\cos\theta, \quad Y_{1,\pm1}=\mp \mathrm{i}\sqrt{\frac{3}{8\pi}}\sin\theta\cdot \mathrm{e}^{\pm \mathrm{i}\varphi},$$

式中 $\theta$、$\varphi$ 为极角和方向 $\boldsymbol{n}$ 对 $z$ 轴的方位角. 计算梯度时，我们求出具有一定 $m$ 值的偶极辐射的角分布表达式

---

① 可能会出现这样的情形:根据近似选择定则，跃迁几率变为零，而近似选择定则仅当忽略电子的自旋-轨道相互作用时才是正确的. 这时，为了得到非零的结果，所用的波函数必须考虑这种相互作用的相对论修正.

② 乍看起来，由于空间的各向同性，光子发射的总几率似乎不应该依赖于 $m$ 值. 情况并非如此. 不难理解，当系统的初态给定时，不同的终态对应着发射的光子有不同的 $m$ 值；比较下面的法则(46.16).

$$dw_{10}=w_{10}\frac{3}{8\pi}\sin^2\theta do,\ dw_{1,\pm1}=w_{1,\pm1}\frac{3}{8\pi}\ \frac{1+\cos^2\theta}{2}do. \quad (46.13)$$

当然，这些公式也可以由式(45.6)得出：首先(对 $m=0$)假设 $d_x=d_y=0, d_z=d$；然后(对 $m=\pm1$)假设 $d_y=\mp id_x=d/\sqrt{2}, d_z=0$.

如果系统(原子或原子核)线度的数量级为 $a$，则电多极矩的数量级一般来说为 $Q_{jm}^{(电)}\sim a^j$. 多极辐射的几率为

$$w_{jm}^{(电)}\sim\alpha k(ka)^{2j}. \quad (46.14)$$

若极数增加1，则辐射几率减小一个因子$\sim(ka)^2$.

角动量和宇称的守恒定律引出一定的选择定则，限制辐射系统状态的可能改变. 如果系统的初始角动量等于 $J_i$，那么发射角动量为 $j$ 的光子后，系统的角动量只能取角动量加法法则($\boldsymbol{J}_i-\boldsymbol{J}=\boldsymbol{j}$)所决定的 $J_f$ 值:

$$|J_i-J_f|\leqslant j\leqslant J_i+J_f. \quad (46.15)$$

当 $J_i$ 和 $J_f$ 的值给定后，光子角动量的可能值 $j$ 由同样的法则(46.15)决定. 但是，由于辐射几率随 $j$ 的增加迅速衰减，所以辐射基本上以最低可能的极数发生.

角动量 $\boldsymbol{J}_i$ 和 $\boldsymbol{J}_f$ 的分量 $M_i$ 和 $M_f$ 与光子角动量的分量$m$(根据同样的角动量加法定律)满足关系

$$M_i-M_f=m. \quad (46.16)$$

辐射系统的初态和终态宇称 $P_i$ 和 $P_f$ 应该满足条件 $P_fP_{光子}=P_i$，这里 $P_{光子}$ 是所辐射的光子的宇称. 因为宇称只具有$\pm1$值，所以这个条件也可以写成

$$P_iP_f=P_{光子}. \quad (46.17)$$

对于电型光子，$P_{光子}=(-1)^j$，因而电多极辐射的宇称选择定则是

$$P_iP_f=(-1)^j. \quad (46.18)$$

总角动量和宇称的选择定则是非常严格的，任何系统在辐射时都应该遵守. 与此同时，存在着另外一些有局限性的选择定则，

它们与特定辐射系统的某种结构特征相关. 这样的选择定则难免具有一定程度的近似性质，我们将在本章的后面几节中研究它们.

发射几率对量子数 $m$、$M_i$、$M_f$ 的依赖关系完全由多极矩的张量性质决定. 具有一定 $j$ 的量 $Q_{jm}$ 构成 $j$ 秩球张量，它的矩阵元对上述量子数的依赖关系由公式

$$|\langle n_f J_f M_f | Q_{j,-m} | n_i J_i M_i \rangle|^2 = \begin{pmatrix} J_f & j & J_i \\ M_f & m & -M_i \end{pmatrix}^2 |\langle n_f J_f \| Q_j \| n_i J_i \rangle|^2 \qquad (46.19)$$

给出[参看第三卷(107.6)]，式中的字母 $n$ 表示除了 $J$ 和 $M$ 以外系统状态的其余量子数. 等式(46.19) 右边的约化矩阵元不依赖于量子数 $m$、$M_i$、$M_f$. 将这个公式代入式(46.9) 就能确定所求的依赖关系，它正比于

$$\begin{pmatrix} J_f & j & J_i \\ M_f & m & -M_i \end{pmatrix}^2$$

(当然，这时假设辐射体不在外场中，所以跃迁频率 $\omega$ 与 $M_i$ 和 $M$ 无关).

对所有的 $M_f$ 值求几率和 (设 $M_i$ 为已知)，我们得到由系统的初态能级 $n_i J_i$ 发射已知频率光子的总几率. 显然，由于空间的各向同性，这个量也将与初值 $M_i$ 无关. 求和时，要用到公式

$$\sum_{M_f} |\langle n_f J_f M_f | Q_{j,-m} | n_i J_i M_i \rangle|^2 = \frac{1}{2J_i+1} |\langle n_f J_f \| Q_j \| n_i J_i \rangle|^2 \qquad (46.20)$$

[参看第三卷(107.11)].

## §47. 磁多极辐射

磁型光子的波函数是 $A^\mu = (0, \boldsymbol{A})$，$\boldsymbol{A}$ 由公式(7.6) 给出. 将它代入式(46.1)，我们得到跃迁矩阵元

$$V_{fi}=-e\frac{\sqrt{\omega}}{2\pi}\int d^3x\cdot \boldsymbol{j}_{fi}(\boldsymbol{r})\int do_n\cdot e^{-ikr}\mathbf{Y}_{jm}^{(磁)*}(\boldsymbol{n}). \tag{47.1}$$

像式(7.16)中那样，矢量 $\mathbf{Y}_{jm}^{(磁)}$ 的分量可用 $j$ 阶球谐函数表达. 再利用展开式(46.3)，我们得到内积分

$$\int e^{-i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}}\mathbf{Y}_{jm}^{(磁)*}(\boldsymbol{n})do_n=4\pi i^{-j}g_j(kr)\mathbf{Y}_{jm}^{(磁)*}\left(\frac{\boldsymbol{r}}{r}\right),$$

将式(46.5)的 $g_j$ 代入后①，

$$V_{fi}=-ei^{-j}\frac{2\omega^{j+\frac{1}{2}}}{(2j+1)!!}\int \boldsymbol{j}_{fi}(\boldsymbol{r})\cdot r^j\mathbf{Y}_{jm}^{(磁)*}\left(\frac{\boldsymbol{r}}{r}\right)d^3x.$$

根据定义(7.4)，这里必须代入

$$\mathbf{Y}_{jm}^{(磁)}\left(\frac{\boldsymbol{r}}{r}\right)=\frac{1}{\sqrt{j(j+1)}}(\boldsymbol{r}\times\nabla Y_{jm}).$$

然后应用公式

$$r^j\boldsymbol{j}_{fi}\cdot(\boldsymbol{r}\times\nabla Y_{jm}^*)=-(\boldsymbol{r}\times\boldsymbol{j}_{fi})\cdot\nabla(r^jY_{jm}^*)$$

将被积函数改写，我们得到

$$V_{fi}=(-1)^m i^j\sqrt{\frac{(2j+1)(j+1)}{\pi j}}\frac{\omega^{j+\frac{1}{2}}}{(2j+1)!!}e(Q_{j,-m}^{(磁)})_{fi} \tag{47.2}$$

式中引入的量

$$(Q_{jm}^{(磁)})_{fi}=\frac{1}{j+1}\sqrt{\frac{4\pi}{2j+1}}\int(\boldsymbol{r}\times\boldsymbol{j}_{fi})\cdot\nabla(r^jY_{jm})d^3x \tag{47.3}$$

叫做**磁 $2^j$ 极跃迁矩**.

由于发射几率的表达式(47.2)和(46.6)之间的相似性，可以得到和式(46.9)同样的公式，差别仅仅是磁矩代替了电矩. 角分布的公式 (46.12) 也仍然成立 [这一点在讨论(7.11) 时曾经指出过].

---

① 不要把流 $j$ 与角动量 $j$ 混淆了!

我们来研究 $j=1$ 时表达式(47.3)的形式．在这种情形下，函数是

$$\sqrt{\frac{4\pi}{3}}rY_{10}=\mathrm{i}z,\qquad \sqrt{\frac{4\pi}{3}}rY_{1,\pm1}=\mp\frac{\mathrm{i}}{\sqrt{2}}(x\pm \mathrm{i}y),$$

它们的梯度就等于式 (7.14) 的球单位矢量 $\boldsymbol{e}^{(0)}$, $\boldsymbol{e}^{(\pm1)}$. 所以量 $e[Q_{1m}^{(磁)}]_{fi}$ 是矢量

$$\boldsymbol{\mu}_{fi}=\frac{e}{2}\int(\boldsymbol{r}\times\boldsymbol{j}_{fi})\mathrm{d}^3x \tag{47.4}$$

的球分量．这个矢量在形式上和经典磁矩相似(参看第二卷§44)．公式(用通常的单位)

$$w=\frac{4\omega^3}{3\hbar c^3}|\boldsymbol{\mu}_{fi}|^2 \tag{47.5}$$

通过这个矢量给出 $M$ 1-辐射的总几率．我们来看公式(47.4) 怎样与磁矩算符一般的非相对论量子表达式相联系．

跃迁流的表达式(参看第三卷 § 115)为

$$\boldsymbol{j}_{fi}=-\frac{\mathrm{i}}{2m}(\psi_f^*\nabla\psi_i-\psi_i\nabla\psi_f^*)+\frac{\mu}{es}\mathrm{rot}(\psi_f^*\hat{\boldsymbol{s}}\psi_i), \tag{47.6}$$

式中 $\mu$ 是粒子的磁矩，$s$ 是它的自旋．所以

$$\boldsymbol{\mu}_{fi}=-\frac{\mathrm{i}e}{4m}\int\psi_f^*(\boldsymbol{r}\times\nabla)\psi_i\mathrm{d}^3x+\frac{\mathrm{i}e}{4m}\int\psi_i(\boldsymbol{r}\times\nabla)\psi_f^*\mathrm{d}^3x$$

$$+\frac{\mu}{2s}\int[\boldsymbol{r}\times\mathrm{rot}(\psi_f^*\hat{\boldsymbol{s}}\psi_i)]\mathrm{d}^3x. \tag{47.7}$$

在第二项中我们写出

$$\int\psi_i(\boldsymbol{r}\times\nabla)\psi_f^*\mathrm{d}^3x=-\int\psi_f^*(\boldsymbol{r}\times\nabla)\psi_i\mathrm{d}^3x+\int\mathrm{rot}(\boldsymbol{r}\psi_f^*\psi_i)\mathrm{d}^3x.$$

最后一个积分可以改写成对无限远平面的积分，因而等于零．所以式(47.7)中的头两项是相同的．在第三项中我们按如下方法将积分改写成(暂时采用符号 $\boldsymbol{F}=\psi_f^*\hat{\boldsymbol{s}}\psi_i$)：

$$\int[\boldsymbol{r}\times(\nabla\times\boldsymbol{F})]\mathrm{d}^3x=\oint[\boldsymbol{r}\times(\boldsymbol{df}\times\boldsymbol{F})]-\int[(\boldsymbol{F}\times\nabla)\times\boldsymbol{r}]\mathrm{d}^3x.$$

面积分等于零，而在最后一个积分中我们有：

$$(\boldsymbol{F}\times\nabla)\times\boldsymbol{r}=-\boldsymbol{F}\cdot\mathrm{div}\boldsymbol{r}+\boldsymbol{F}=-2\boldsymbol{F}.$$

所以，

$$\int(\boldsymbol{r}\times\mathrm{rot}\boldsymbol{F})\mathrm{d}^3x=2\int\boldsymbol{F}\mathrm{d}^3x.$$

结果，$\mu_{fi}$ 的表达式变成

$$\mu_{fi}=\int\psi_f^*\left(\frac{e}{2m}\hat{\boldsymbol{L}}+\frac{\mu}{s}\hat{\boldsymbol{s}}\right)\psi_i\mathrm{d}^3x, \tag{47.8}$$

式中 $\hat{\boldsymbol{L}}=-\mathrm{i}(\boldsymbol{r}\times\nabla)$ 为粒子的轨道角动量算符．因而 $\mu_{fi}$ 是算符

$$\hat{\mu}=\frac{e}{2m}\hat{\boldsymbol{L}}+\frac{\mu}{s}\hat{\boldsymbol{s}} \tag{47.9}$$

的矩阵元．式(47.9)包含粒子的轨道磁矩算符和内禀磁矩算符．

磁多极辐射的选择定则和电多极辐射相似：选择定则(46.15)，(46.16)仍对总角动量成立，而宇称的选择定则为

$$P_iP_f=(-1)^{j+1}, \tag{47.10}$$

它是把 $Mj$ 光子的宇称 $P_{光子}=(-1)^{j+1}$ 代入(46.17)中得到的．

## §48. 角分布和辐射的极化

§46 和 §47 中所推导的公式属于具有一定角动量 $j$ 及其分量 $m$ 的光子的发射．相应地，可以假设辐射系统(譬如原子核)在辐射前后不仅具有一定的角动量值 $J$，而且具有一定的极化，即一定的 $M$ 值．

现在我们来研究部分极化核辐射的更一般的情形（核的线度仍然假设比波长小）．设所发射的光子仍旧具有一定的角动量 $j$，但可以是部分极化的．我们来求作为光子方向 $\boldsymbol{n}$ 的函数的发射几率．它必须由描述核和光子极化状态的密度矩阵来表达．

为此目的，对初终态原子核都具有确定的 $J_iM_i$ 和 $J_fM_f$ 值

的情形，我们首先把发射几率写成光子方向 $\boldsymbol{n}$ 和螺旋性 $\lambda(\lambda=\pm1)$ 的函数.

发射 $j, m$ 一定的光子的矩阵元正比于原子核的 $2^j$ 极矩（电矩或磁矩）的矩阵元.

$$\langle J_f M_f; jm|V|J_i M_i\rangle \propto (-1)^m \langle J_f M_f|Q_{j,-m}|J_i M_i\rangle. \quad (48.1)$$

被发射光子的波函数（在动量表象中）正比于 $\mathbf{Y}^{(电)}_{jm}(\boldsymbol{n})$ 或 $\mathbf{Y}^{(磁)}_{jm}(\boldsymbol{n})$. 动量方向为 $\boldsymbol{n}$、螺旋性为 $\lambda$ 的光子波函数正比于极化矢量 $\boldsymbol{e}^{(\lambda)}$. 发射 $\boldsymbol{n}\lambda$ 光子的矩阵元由式 (48.1) 乘以状态 $|jm\rangle$ 的波函数在状态 $|\boldsymbol{n}\lambda\rangle$ 的波函数上的分量得到:

$$\langle J_f M_f; \boldsymbol{n}\lambda|V|J_i M_i\rangle \propto (-1)^m \langle J_f M_f|Q_{j,-m}|J_i M_i\rangle [\boldsymbol{e}^{(\lambda)*}\mathbf{Y}_{jm}].$$

按照式(16.23)，对于两种类型的光子，

$$\boldsymbol{e}^{(\lambda)*}\mathbf{Y}_{jm}(\boldsymbol{n}) \propto D^{(j)}_{\lambda m}(\boldsymbol{n}). \quad (48.2)$$

多极矩的矩阵元通常用约化矩阵元表示. 结果，我们得到跃迁几率幅度为

$$\langle J_f M_f; \boldsymbol{n}\lambda|V|J_i M_i\rangle \propto (-1)^{J_f-M_f+m} \begin{pmatrix} J_f & j & J_i \\ -M_f & -m & M_i \end{pmatrix} Q D^{(j)}_{\lambda m}, \quad (48.3)$$

式中的 $Q$ 代表 $\langle J_f\|Q\|J_i\rangle$.

现在我们来讨论混合极化态的一般情形. 按照量子力学的一般法则，跃迁几率将正比于表达式①

---

① 如果系统的初态和终态通过叠加

$$\psi^{(i)} = \sum_n a_n \psi^{(i)}_n, \qquad \psi^{(f)} = \sum_m b_m \psi^{(f)}_m$$

描述，那么矩阵元为

$$\langle f|V|i\rangle = \sum_{mn} b^*_m a_n V_{mn},$$

它的平方为

$$|\langle f|V|i\rangle|^2 = \sum_{nn'mm'} V_{mn} V^*_{m'n'} a_n a^*_{n'} b_{m'} b^*_m.$$

通过代换

$$a_n a^*_{n'} \to \rho^{(i)}_{nn'}, \; b_{m'} b^*_m \to \rho^{(f)}_{m'm}$$

可以得到混合态的情形，因而

$$|\langle f|V|i\rangle|^2 \to \sum_{nn'mm'} V_{mn} V^*_{m'n'} \rho^{(i)}_{nn'} \rho^{(f)}_{m'm}.$$

$$\sum_{(m)}\langle J_fM_f;\boldsymbol{n}\lambda|V|J_iM_i\rangle\langle J_fM_f';\boldsymbol{n}\lambda'|V|J_iM_i'\rangle^*$$

$$\times\langle M_i|\rho^{(i)}|M_i'\rangle\langle M_f'|\rho^{(f)}|M_f\rangle\langle\lambda'|\rho^{(\gamma)}|\lambda\rangle \qquad (48.4)$$

$\rho^{(i)}, \rho^{(f)}, \rho^{(\gamma)}$分别为初态核、终态核和所发射光子的密度矩阵，求和号下的$(m)$表示求和对所有重复出现两次的$m$-型量$(M_iM_i'M_f M_f'\lambda\lambda')$进行，再将式(48.3)代入式(48.4)。

立体角$do$内光子的发射几率用$w(\boldsymbol{n})do$表示．显然，在任一方向上以及对于光子和终态核的任一极化，总发射几率与核的初始极化状态无关，这已由我们熟知的公式给出，这里不去研究．我们将几率$w(\boldsymbol{n})$归一化为1，结果得到①

$$w(\boldsymbol{n})=\frac{(2j+1)(2J+1)}{8\pi}\sum_{(m)}(-1)^{2J_i-M_i-M_i'}D^{(j)}_{\lambda m}D^{(j)*}_{\lambda' m'}$$

$$\times\begin{pmatrix}J_f & j & J_i\\ -M_f & -m & M_i\end{pmatrix}\begin{pmatrix}J_f & j & J_i\\ -M_f' & -m' & M_i'\end{pmatrix}\langle M_i|\rho^{(i)}|M_i'\rangle\times$$

$$\times\langle M_f'|\rho^{(f)}|M_f\rangle\langle\lambda'|\rho^{(\gamma)}|\lambda\rangle$$

(这个归一化的正确性我们将在下面看到)．这个公式可以进行改写，为此，我们先把两个$D$函数之积展成第三卷的式(110.2)的级数

$$D^{(j)}_{\lambda m}D^{(j)*}_{\lambda' m'}=(-1)^{\lambda'+m'}D^{(j)}_{\lambda m}D^{(j)}_{-\lambda',-m'}$$

$$=(-1)^{\lambda+m}\sum_L(2L+1)\begin{pmatrix}j & j & L\\ \lambda & -\lambda' & -\Lambda\end{pmatrix}\begin{pmatrix}j & j & L\\ m & -m' & -\mu\end{pmatrix}D^{(L)}_{\Lambda\mu}$$

$(\Lambda=\lambda-\lambda', \mu=m-m'; L$为整数，$L\geqslant 2j)$．这样，我们最后得到

$$w(\boldsymbol{n})=\frac{(2j+1)(2J_i+1)}{8\pi}\sum_L\sum_{(m)}(-1)^{2J_i-M_i-M_i'+m+1}(2L+1)$$

---

① 当改写符号因子时，可以利用$2J_i, 2J_f, 2M_i, 2M_f$有相同的字称，还要记住$j$，$m$为整数，而$\lambda=\pm1$.

$$
\times\begin{pmatrix} j & j & L \\ \lambda & -\lambda' & -\Lambda \end{pmatrix}\begin{pmatrix} j & j & L \\ m & -m' & -\mu \end{pmatrix}\begin{pmatrix} J_f & j & J_i \\ -M_f & -m & M_i \end{pmatrix}
$$

$$
\times\begin{pmatrix} J_f & j & J_i \\ -M'_f & -m' & -M'_i \end{pmatrix}
$$

$$
\times D_{\Lambda\mu}^{(L)}(\boldsymbol{n})\langle M_i|\rho^{(i)}|M'_i\rangle\langle M'_f|\rho^{(f)}|M_f\rangle\langle\lambda'|\rho^{(\nu)}|\lambda\rangle. \tag{48.5}
$$

和上面一样，$\sum\limits_{(m)}$表示对所有出现两次的 $m$-型量求和. 这里必须指出，$\lambda,\lambda'$ 与其它 $m$-型量不同，它们只有两个值：$\lambda,\lambda'=\pm 1$，而不是 $2j+1$ 个值(对给定的 $j$)；这两个值对应着光子的两种极化.

公式(48.5)包含着所发射光子的角分布、它们的极化以及次级核(发射光子以后的核)的极化等全部信息，这里我们假设起始密度矩阵是已知的.

**角分布**

对光子和次级核的所有极化求和，就可得到光子的角分布. 对极化的平均是把非极化态的密度矩阵

$$
\langle\lambda|\rho^{(\nu)}|\lambda'\rangle=\frac{1}{2}\delta_{\lambda\lambda'},\quad \langle M_f|\rho^{(f)}|M'_f\rangle=\frac{1}{2J_f+1}\delta_{M_f M'_f} \tag{48.6}
$$

代入，然后，求和就是乘以 2(对光子)或 $2J_f+1$(对核). 换句话说，求和就是代换

$$
\langle\lambda|\rho^{(\nu)}|\lambda'\rangle\to\delta_{\lambda\lambda'},\quad \langle M_f|\rho^{(f)}|M'_f\rangle\to\delta_{M_f M'_f}, \tag{48.7}
$$

所以，角分布为

$$
\bar{w}(\boldsymbol{n})=\frac{(2j+1)(2J_i+1)}{8\pi}\sum_L\sum_{(m)}(-1)^{m'+1}(2L+1)D_{0\mu}^{(L)}(\boldsymbol{n})
$$

$$
\times\begin{pmatrix} j & j & L \\ \lambda & -\lambda & 0 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} j & j & L \\ m & -m' & -\mu \end{pmatrix}\begin{pmatrix} J_f & j & J_i \\ -M_f & -m' & M_i \end{pmatrix}
$$

$$\times\begin{pmatrix} J_f & j & J_i \\ -M_f & -m' & M_i' \end{pmatrix}\langle M_i|\rho^{(i)}|M_i'\rangle.$$

这个公式可以通过对 $m$-型量求和而大大简化.

首先，我们看到

$$\begin{pmatrix} j & j & L \\ \lambda & -\lambda & 0 \end{pmatrix}=(-1)^L\begin{pmatrix} j & j & L \\ -\lambda & \lambda & 0 \end{pmatrix}, \tag{48.8}$$

因此，

$$\sum_{\lambda=\pm1}\begin{pmatrix} j & j & L \\ \lambda & -\lambda & 0 \end{pmatrix}=\begin{cases} 2\begin{pmatrix} j & j & L \\ 1 & -1 & 0 \end{pmatrix} & L\text{ 为偶}, \\ 0 & L\text{ 为奇}. \end{cases}$$

这样，对 $L$ 的求和只剩下 $L$ 为偶数的项，即其中只包含偶阶球谐函数($D_{0\mu}^{(L)}$). 这个结果是可以预见的：因为宇称守恒，几率应该对反演不变，即对代换 $\boldsymbol{n}\to-\boldsymbol{n}$ 不变.

这样一来，就有

$$\begin{aligned} \bar{w}(\boldsymbol{n})=&\frac{(2j+1)(2J_i+1)}{4\pi}\sum_L(2L+1)\begin{pmatrix} j & j & L \\ 1 & -1 & 0 \end{pmatrix}D_{0\mu}^{(L)}(\boldsymbol{n})\cdot \\ &\times\sum_{(m)}(-1)^{m'+1}\times\begin{pmatrix} j & j & L \\ m & -m' & -\mu \end{pmatrix}\begin{pmatrix} J_f & j & J_i \\ -M_f & -m & M_i \end{pmatrix} \\ &\times\begin{pmatrix} J_f & j & J_i \\ -M_f & -m' & M_i' \end{pmatrix}\langle M_i|\rho^{(i)}|M_i'\rangle. \end{aligned}$$

我们看到，在这里归一化是很容易证明的：由于公式

$$\int D_{0\mu}^{(L)}(\boldsymbol{n})\frac{do}{4\pi}=\delta_{L0}\delta_{\mu0},$$

对所有方向积分后，只剩下 $L=\mu=0$ 的项. 利用公式

$$\begin{pmatrix} j & j & 0 \\ m & -m & 0 \end{pmatrix}=(-1)^{j-m}\frac{1}{\sqrt{2j+1}},$$

$$\sum_{M_f m}\begin{pmatrix} J_f & j & J_i \\ -M_f & -m & M_i \end{pmatrix}^2=\frac{1}{2J_i+1}, \mathrm{Sp}\,\rho^{(i)}=1$$

就可证明积分等于 1.

在$\varpi(\boldsymbol{n})$的内求和中，利用第三卷式(108.4)实现对 $m$、$m'$、$M_f$ 的求和. 光子角分布的最后公式是

$$\varpi(\boldsymbol{n})=(-1)^{1+J_i+J_f}\frac{(2j+1)\sqrt{2J_i+1}}{4\pi}$$

$$\times\sum_{\text{偶}L}(-\mathrm{i})^L\sqrt{2L+1}\begin{pmatrix} j & j & L \\ 1 & -1 & 0 \end{pmatrix}\begin{Bmatrix} J_i & J_i & L \\ j & j & J_f \end{Bmatrix}\sum_{\mu}\mathscr{D}_{L\mu}^{(i)*}D_{0\mu}^{(L)}(\boldsymbol{n}),$$

(48.9)

式中

$$\mathscr{D}_{L\mu}^{(i)}=i^L\sqrt{(2L+1)(2J_i+1)}\sum_{M_iM_i'}(-1)^{J_i-M_i'}\begin{pmatrix} J_i & L & J_i \\ -M_i' & \mu & M_i \end{pmatrix}$$

$$\times\langle M_i|\rho^{(i)}|M_i'\rangle,$$

$$\mathscr{D}_{L\mu}^{(i)*}=(-1)^{L-\mu}\mathscr{D}_{L,-\mu}^{(i)}. \tag{48.10}$$

式(48.9)中的内求和是对所有的$|\mu|\leqslant L$进行，而外求和是对满足条件

$$L\leqslant 2j,\quad L\leqslant 2J_i \tag{48.11}$$

的所有偶数值 $L$ 进行[这些条件来自式(48.9)、(48.10)的 $3j$-符号中 $j$ 量应满足的三角形法则]. 由于这些条件，求和中的项数一般很少. 例如，当 $J_i=0$ 或 1/2 时，只剩下 $L=0$ 的项，因而辐射是各向同性的(不难证明，根据归一化条件，$L=0$ 的项应该等于 1/4). 当 $J_i=1,3/2$ 或 $j=1$ 时，对 $L$ 的求和只剩下两项: $L=0,2$. 我们还看到，如果密度矩阵 $\rho^{(i)}$是对角化的($M_i=M_i'$)，则 $\mu=0$，分布函数(48.9)取勒让德多项式的展开形式[按照式(16.5) 和第三卷的式(58.23)，函数 $D_{00}^{(L)}$ 就是函数 $P_L(\cos\theta)$]. 最后，如果

$$\langle M_i|\rho^{(i)}|M_i'\rangle=\frac{1}{2J_i+1}\delta_{M_iM_i'},$$

即如果初态核是非极化的，那么除 $\mathscr{D}_{00}^{(i)}=1$ 以外，所有的

$\mathscr{P}_{L\mu}^{(i)}=0$①.

$\mathscr{P}_{L\mu}$是表征核极化态的最方便的量，我们称它为**极化矩**，公式(48.10)通过密度矩阵 $\rho_{MM'}$ 定义了它. 不难证明，通过极化矩表达密度矩阵的相反公式是

$$\rho_{MM'}=\sum_{L\mu}\sqrt{\frac{2L+1}{2J+1}}i^{-L}(-1)^{J-M'}\begin{pmatrix} J & L & J \\ -M' & \mu & M \end{pmatrix}\mathscr{P}_{L\mu} \tag{48.12}$$

设 $f_{L\mu}$ 是依赖于核极化态的某个球张量. 按照一般法则［参看第三卷式(14.8)］，它在具有密度矩阵 $\rho_{MM'}$ 的状态中的平均值等于

$$\bar{f}_{L\mu}=\sum_{MM'}\rho_{MM'}\langle JM'|f_{L\mu}|JM\rangle. \tag{48.13}$$

根据公式

$$\langle JM'|f_{L\mu}|JM\rangle=i^{L}(-1)^{J-M'}\begin{pmatrix} J & L & J \\ -M' & \mu & M \end{pmatrix}\langle J\|f_L\|J\rangle,$$

通过约化元$\langle J\|f_L\|J\rangle$表达 $f_{L\mu}$ 的矩阵元，并根据(48.10)的定义引入极化矩，我们得到

$$\bar{f}_{L\mu}=\frac{\langle J\|f_L\|J\rangle}{\sqrt{(2L+1)(2J+1)}}\mathscr{P}_{L\mu}. \tag{48.14}$$

## 光子的极化

① 实际上，应用

$$\begin{pmatrix} J & 0 & J \\ -M' & 0 & M \end{pmatrix}=(-1)^{J-M}\frac{1}{\sqrt{2J+1}}\delta_{MM'},$$

我们有

$$\sum_{MM'}(-1)^{J-M'}\begin{pmatrix} J & L & J \\ -M' & \mu & M \end{pmatrix}\delta_{MM'}$$

$$=\sqrt{2J+1}\sum_{MM'}\begin{pmatrix} J & L & J \\ -M' & \mu & M \end{pmatrix}\begin{pmatrix} J & 0 & J \\ -M' & 0 & M \end{pmatrix}=\sqrt{2J+1}\,\delta_{L0}\delta_{\mu0},$$

然后根据定义(48.10)，我们求出上述结果.

当矩阵 $\rho^{(\gamma)}$和$\rho^{(f)}$以及$\rho^{(i)}$给定后，公式(48.5)确定了所发射的光子和核处于一定的极化态的跃迁几率．这些态实质上并不是这种辐射过程的特性，而是探测器(它记录光子和反冲核，并识别它们的确定极化）的特性．这个问题的另一种更自然的表述是："核+光子"系统的终态不是一开始就确定的，只在给定光子发射的方向后，才能确定终态的极化密度矩阵．

这个问题的答案也由公式(48.5)给出．如果把它写成

$$w=\overline{w}(\boldsymbol{n})\sum_{(m)}\langle M_f;\boldsymbol{n}\lambda|\rho|M'_f;\boldsymbol{n}\lambda'\rangle\langle\lambda'|\rho^{(\gamma)}|\lambda\rangle\langle M'_f|\rho^{(f)}|M_f\rangle, \tag{48.15}$$

则表达式$\langle M_f;\boldsymbol{n}\lambda|\rho|M'_f;\boldsymbol{n}\lambda'\rangle$将是所求的密度矩阵，因为按照量子力学的一般法则，跃迁到已知状态的几率 $w$ 由它在给定的 $\rho^{(\gamma)}$，$\rho^{(f)}$上的"投影"给出．在公式(48.15)中分离出因子 $\overline{w}(\boldsymbol{n})$是为了使这个矩阵能够按照一般的条件归一化：

$$\sum_{\lambda M_f}\langle M_f;\boldsymbol{n}\lambda|\rho|M_f;\boldsymbol{n}\lambda\rangle=1.$$

如果只考虑光子的极化，则必须对 $M_f=M'_f$ 求和：

$$\langle\boldsymbol{n}\lambda|\rho|\boldsymbol{n}\lambda'\rangle=\sum_{M_f}\langle M_f;\boldsymbol{n}\lambda|\rho|M_f;\boldsymbol{n}\lambda'\rangle.$$

通过与公式(48.9)完全类似的推导，我们得到

$$\langle\boldsymbol{n}\lambda|\rho|\boldsymbol{n}\lambda'\rangle=(-1)^{1+J_i+J_f}\frac{(2j+1)\sqrt{2J_i+1}}{8\pi\overline{w}(\boldsymbol{n})}$$

$$\times\sum_L(-i)^L\sqrt{2L+1}\begin{pmatrix}j & j & L\\ \lambda & -\lambda' & -\Lambda\end{pmatrix}\begin{Bmatrix}J_i & J_i & L\\ j & j & J_f\end{Bmatrix}\sum_\mu\mathscr{D}^{(i)*}_{L\mu}D^{(L)}_{\Lambda\mu}(\boldsymbol{n}) \tag{48.16}$$

$(\Lambda=\lambda-\lambda')$，求和是对满足条件(48.11)的一切整数值 $L$ 进行．

特别是，圆极化由斯托克斯参数

$$\xi_2=\langle\boldsymbol{n}1|\rho|\boldsymbol{n}1\rangle-\langle\boldsymbol{n},-1|\rho|\boldsymbol{n},-1\rangle$$

决定(参看 §8 习题). 由于关系式(48.8),在这个差中消去了所有含偶数 $L$ 的项. 所得 $\xi_2$ 的公式与表示式(48.9)的区别仅仅是对奇数(而不是偶数)$L$ 值求和.

**终态核的极化**

最后,如果我们只研究核的终态极化,必须令 $\rho^{(\gamma)}\to\delta$. 这时如果还要对光子的方向积分,那么终态核的密度矩阵将是

$$\langle M_f|\rho|M_f'\rangle=\int\overline{w}(\boldsymbol{n})\langle M_f\boldsymbol{n}|\rho|M_f'\boldsymbol{n}\rangle\mathrm{d}o=$$

$$=(2J_i+1)\sum_{mM_iM_i'}(-1)^{2J_i-M_i-M_i'}\begin{pmatrix}J_f & j & J_i\\ -M_f & -m & M_i\end{pmatrix}$$

$$\times\begin{pmatrix}J_f & j & J_i\\ -M_f' & -m & M_i'\end{pmatrix}\langle M_i|\rho^{(i)}|M_i'\rangle.$$

按照这个矩阵计算出的极化矩等于

$$\mathscr{D}^{(f)}_{L\mu}=(-1)^{J_i+J_f+L+j}\sqrt{(2J_i+1)(2J_f+1)}\begin{Bmatrix}J_i & J_i & L\\ J_f & J_f & j\end{Bmatrix}\mathscr{D}^{(i)}_{L\mu}$$

(48.17)

如果初态核是非极化的,则终态核也将是非极化的.但此时存在关联极化,即辐射的方向给定时,辐射后的核是极化的. 令 $\rho^{(i)}\to\delta/(2J_i+1)$(相应地,$\overline{w}(\boldsymbol{n})=1/4\pi$)并进行与推导公式(48.9)类似的计算,就得到描述这种极化的密度矩阵

$$\langle M_f;\boldsymbol{n}|\rho|M_f';\boldsymbol{n}\rangle$$

$$=(2j+1)(-1)^{J_i+M_f'+1}\sum_{\text{偶}L}(2L+1)\begin{pmatrix}j & j & L\\ 1 & -1 & 0\end{pmatrix}$$

$$\times\begin{pmatrix}J_f & L & J_f\\ -M_f' & \mu & M_f\end{pmatrix}\begin{Bmatrix}J_f & J_f & L\\ j & j & J_i\end{Bmatrix}D^{(L)}_{0\mu}(\boldsymbol{n}). \qquad (48.18)$$

相应的极化矩是

$$\mathscr{D}^{(f)}_{L\mu}=i^L(-1)^{1+J_i+J_f}(2j+1)\sqrt{(2L+1)(2J_f+1)}$$

$$\times\begin{pmatrix} j & j & L \\ 1 & -1 & 0 \end{pmatrix}\begin{Bmatrix} J_f & J_f & L \\ j & j & J_i \end{Bmatrix} D_{0\mu}^{(L)}(\boldsymbol{n}). \tag{48.19}$$

只有偶数级的极化矩出现(这也是早先提到过的宇称守恒的结果).

如果二次核依次产生辐射，那么由于它已极化，将产生各向异性的光子分布. 因为极化矩(48.19)依赖于前次衰变时所发射的光子的方向 $\boldsymbol{n}$，所以相继发射的光子的方向之间存在一定的关联(一次核是非极化的). 用类似方法可以处理级联发射的其它关联效应(极化的相互关系等)①.

## 习　题

求极化矩 $\mathscr{P}_{1\mu}$ 和 $\mathscr{P}_{2\mu}$ 与角动量矢量 $\boldsymbol{J}$ 和四极矩张量 $Q_{ik}$ 之间的关系.

**解**　矢量 $\boldsymbol{J}$ 和张量 $Q_{ik}$ 的约化矩阵元由下式决定:

$$\overline{\boldsymbol{J}^2}=\frac{\langle J\|J\|J\rangle^2}{2J+1},\qquad \overline{Q_{ik}^2}=\frac{\langle J\|Q\|J\rangle^2}{2J+1}$$

[比较第三卷公式(107.10)和(107.11)]. 算符 $\hat{Q}_{ik}$ 通过角动量算符由第三卷式(75.2)表示:

$$\hat{Q}_{ik}=\frac{3Q}{2J(2J-1)}\left(\hat{J}_i\hat{J}_k+\hat{J}_k\hat{J}_i-\frac{2}{3}\hat{J}^2\delta_{ik}\right).$$

由此求出平均值

$$\overline{Q}_{ik}^2=\frac{3Q^2}{2J^2(2J-1)^2}\boldsymbol{J}^2(4\boldsymbol{J}^2-3)=Q^2\frac{3(J+1)(2J+3)}{2J(2J-1)}.$$

约化矩阵元为

$$\langle J\|J\|J\rangle=\sqrt{J(J+1)(2J+1)},$$

$$\langle J\|Q\|J\rangle=Q\sqrt{\frac{3(2J+1)(J+1)(2J+3)}{2J(2J-1)}}.$$

根据式(48.14)，极化矩 $\mathscr{P}_{1\mu}$ 等于矢量

$$\sqrt{\frac{3}{J(J+1)}}\overline{\boldsymbol{J}}$$

① 这个问题的详细论述可以参阅苏联科学院1961年出版的《γ-射线》("Гамма-лучи")一书中 А. З. Долгинов 的论文.

的球分量，而极化矩 $\mathscr{D}_{2\mu}$ 等于张量

$$\sqrt{\frac{10J(2J-1)}{3(J+1)(2J+3)}}\cdot\frac{\overline{Q}_{ik}}{Q}$$

的球分量.

## § 49. 原子辐射：电型①

原子外层(参加光学辐射跃迁的)电子的能量约为$E\sim me^4/\hbar^2$，因而所辐射的波长 $\lambda\sim\hbar c/E\sim\hbar^2/\alpha me^2$. 原子的线度 $a\sim\hbar^2/me^2$. 所以在原子光谱中，不等式 $a/\lambda\sim\alpha\ll1$ 照例成立. 比值 $v/c\sim\alpha$ 具有同样的数量级，这里 $v$ 为光电子速度.

由此可见，在原子光谱中，选择定则所容许的电偶极辐射的几率大大超过多极跃迁的几率②. 由于这个原因，在原子光谱中最重要的正是电偶极跃迁.

我们已经说过，这种跃迁遵守关于原子总角动量 $J$ 和宇称 $P$ 的严格的选择定则③

$$|J'-J|\leqslant1\leqslant J+J', \tag{49.1}$$

$$PP'=-1. \tag{49.2}$$

不等式 $|J'-J|\leqslant1$ 意味着角动量 $J$ 只能改变 0，±1；而由于 $J+J'\geqslant1$，$0\to0$ 跃迁是禁止的. 初态和终态的宇称应该相反④.

$nJM\to n'J'M'$ 跃迁的发射几率由原子偶极矩的相应矩阵元确定如下：

$$w(nJM\to n'J'M')=\frac{4\omega^3}{3\hbar c^3}|\langle n'J'M'|d_{-m}|nJM\rangle|^2, \tag{49.3}$$

$$\omega=\omega(nJ\to n'J').$$

---

① 在 § 49—§ 51，§ 53—§ 55 中采用通常的单位.

② 在原子光谱的光学区域内，偶极跃迁几率的典型数值约为 $10^8$ 秒$^{-1}$.

③ 现在我们用不带撇和带撇的字母分别表示初态和终态的量子数，用字母 $n, n'$ 表示决定系统状态的所有其它(除了明显指出以外的)量子数.

④ 宇称选择定则是 Laporte 建立的(O. Laporte, 1924).

当 $M$ 给定时，公式(49.3)对 $M'=M-m$ 的所有值求和，可以得到由原子能级 $nJ$ 发射已知频率的总几率. 求和时，利用式(46.20)，结果为

$$w(nJ\to n'J')=\frac{4\omega^3}{3\hbar c^3}\frac{1}{2J+1}|\langle n'J'\|d\|nJ\rangle|^2. \qquad (49.4)$$

这里的约化矩阵元的模的平方有时叫**跃迁线强度**，它对于初态和终态是对称的.

观察到的辐射强度等于 $w$ 乘以 $\hbar\omega$，再乘以辐射源中处于该激发能级上的原子数 $N_{nJ}$. 所以，在温度为 $T$ 的气体中，

$$N_{nJ}\propto(2J+1)\exp(-E_{nJ}/T),$$

因子$(2J+1)$是角动量为 $J$ 的能级的统计权重.

原子光谱跃迁几率的进一步推导需要具体指定原子的状态。在这里我们将不讨论矩阵元的计算方法，因为它的近似程度没有明显的理论意义. 我们将只对 $LS$ 耦合的各种状态(特别是在轻原子中)推导出若干个关系式(参看第三卷 §72). 描述这样的状态除了用总角动量以外，还要用轨道角动量 $L$ 和自旋 $S$ 的确定值，这时 $L$ 和 $S$ 都是守恒量.

由于偶极矩是纯粹的轨道量，所以它的算符与自旋算符对易，即它的矩阵对于数 $S$ 是对角化的. 对于数 $L$，偶极矩所遵守的选择定则与任意轨道矢量相同（参看第三卷 § 29). 所以，$LS$ 型各态之间的跃迁除遵守选择定则(49.1)和(49.2)外，还遵守以下的选择定则:

$$S'-S=0, \qquad (49.5)$$

$$|L'-L|\leqslant 1\leqslant L+L'. \qquad (49.6)$$

我们再次着重指出，这些定则是近似的，当考虑自旋-轨道相互作用时就不再成立.

我们看到，选择定则(49.5)(它禁止不同多重态的项之间的跃

迁）不仅适用于电偶极跃迁，而且适用于一切电型跃迁：各种电多极矩都是轨道张量，因而它们的矩阵对自旋是对角化的．例如，对于电四极跃迁，除了一般的选择定则

$$|J'-J|\leqslant 2\leqslant J+J',\quad PP'=1 \tag{49.7}$$

外，在 $LS$ 耦合情形下还有附加选择定则

$$S'-S=0,\quad |L'-L|\leqslant 2\leqslant L+L'. \tag{49.8}$$

发射几率可写成 $S,J,J'$ 的显函数形式．当角动量相加时，利用球张量矩阵元的一般公式，就可直接做到这一点．按照第三卷的公式(109.3)，我们有①

$$|\langle n'L'SJ'\|d\|nLSJ\rangle|^2=(2J+1)(2J'+1)\times\begin{Bmatrix}L' & J' & S\\ J & L & 1\end{Bmatrix}^2|\langle n'L'\|d\|nL\rangle|^2. \tag{49.9}$$

将此式代入式(49.4)，我们得到

$$w(nLSJ\to n'L'SJ')=\frac{4\omega^3}{3\hbar c^3}(2J'+1)\begin{Bmatrix}L' & J' & S\\ J & L & 1\end{Bmatrix}^2\times|\langle n'L'\|d\|nL\rangle|^2, \tag{49.10}$$

并且 $\omega=\omega(nLS\to n'L'S)$②．

对这些几率可以导出一个求和法则．$6j$ 符号的平方满足求和公式［参看第三卷式(108.7)］

$$\sum_{J'}(2J'+1)\begin{Bmatrix}L' & J' & S\\ J & L & 1\end{Bmatrix}^2=\frac{1}{2L+1}. \tag{49.11}$$

借助它可以由式(49.10)求出

$$\sum_{J'}w(nLSJ\to n'L'SJ')=\frac{4\omega^3}{3\hbar c^3}\frac{1}{2L+1}|\langle n'L'\|d\|nL\rangle|^2. \tag{49.12}$$

---

① 第三卷§109的公式中，“子系统1和2的角动量”现在必须理解成原子的轨道角动量和自旋，它们之间的相互作用被忽略．量 $f_q^{(1)}$ 用轨道矢量 $d_q$ 表示．

② 计算矩阵元时忽略自旋-轨道相互作用，还可以忽略频率对 $J$ 和 $J'$ 的依赖关系，即忽略原子初态和终态能级的精细结构．

我们看到，这个量与 $J$ 的初值无关.

对于气体辐射，如果气体的温度比原子项 $nSL$ 的精细结构间隔大得多，那么，不同 $J$ 的状态被均匀占据，即所有的 $J$ 值都是等几率的. 在这种情况下，原子处在某个确定 $J$ 值能级上的几率等于

$$\frac{2J+1}{(2L+1)(2S+1)}, \tag{49.13}$$

即等于这个能级的统计权重与原子项 $nSL$ 的总统计权重之比. 表达式(49.10)或它们的和(49.12)对这些几率的平均归结为乘以因子(49.13)，这个平均用字母上加一短横表示. 光谱多重线中所有谱线（由两个原子项 $nSL$ 和 $n'SL'$ 的精细结构分量之间的一切可能跃迁所形成）的总发射几率为

$$\overline{w}(nLS\to n'L'S)=\sum_{J}\sum_{J'}\overline{w}(nLSJ\to n'L'SJ'). \tag{49.14}$$

自然，由于 $\sum\limits_{J}(2J+1)=(2s+1)(2L+1)$，所得的总几率表达式与式(49.12)一致. 所以，一条单线的相对几率（即相对强度）为

$$\frac{\overline{w}(nLSJ\to n'L'SJ')}{\overline{w}(nLS\to n'L'S)}=\frac{(2J+1)(2J'+1)}{(2S+1)}\begin{Bmatrix}L' & J' & S\\ J & L & 1\end{Bmatrix}^2. \tag{49.15}$$

分析这个公式所给出的数值，可以看出：多重谱线中 $\Delta J=\Delta L$ 的那些谱线最强（叫做**主线**，其余的被称为**伴线**）. $J$ 的初值愈大，则主线的强度愈大.

量(49.15)对 $J$ 和 $J'$ 求和分别给出

$$\begin{aligned}\frac{\sum\limits_{J'}\overline{w}(nLSJ\to n'L'SJ')}{\overline{w}(nLS\to n'L'S)}&=\frac{2J+1}{(2L+1)(2S+1)},\\ \frac{\sum\limits_{J}\overline{w}(nLSJ\to n'L'SJ')}{\overline{w}(nLS\to n'L'S)}&=\frac{2J'+1}{(2L+1)(2S+1)}.\end{aligned} \tag{49.16}$$

由此可见，具有同一初态能级（或终态能级）的光谱多重线中，所有

谱线的总强度与初态能级(或终态能级)的统计权重成正比.

我们还可以考虑原子光谱线的超精细结构. 要知道, 原子能级的超精细分裂是电子与原子核的自旋(假如它不为零)相互作用的结果(参看第三卷 §122). 原子(包括原子核)的总角动量 $\boldsymbol{F}$ 等于电子的总角动量 $\boldsymbol{J}$ 和原子核的角动量 $\boldsymbol{I}$ 的迭加. 能级 $nJ$ 的每一个超精细结构分量都用一个量子数 $F$ 表征.

现在, 角动量的严格守恒导致关于总角动量 $F$ 的严格的选择定则. 对于电偶极辐射,

$$|F'-F| \leqslant 1 \leqslant F+F'. \tag{49.17}$$

但是,由于电子与原子核自旋的相互作用极其微弱,在计算原子中电子壳层的电矩(和磁矩)的矩阵元时,完全可以忽略. 所以,原先关于电子角动量 $J$ 和电子宇称的选择定则也仍然成立. 特别是,电子宇称的选择定则禁止同一项的超精细结构各分量间的电偶极跃迁:这些能级全都具有相同的宇称,而这样的跃迁只可能发生在不同宇称的状态之间.

由于偶极矩算符与原子核的自旋对易, 所以矩阵元对量子数 $I$ 和 $F$ 的依赖关系可以写成明显的形式; 这些计算与上面对 $LS$ 耦合所进行的计算的区别, 仅仅是符号上的明显改变而已. 通过对总角动量 $\boldsymbol{F}$ 的终态分量值求和,便得到发射几率

$$w(nJIF \to n'J'IF') = \frac{4\omega^3}{3\hbar c^3}\frac{1}{2F+1}|\langle n'J'IF' \| d \| nJIF\rangle|^2, \tag{49.18}$$

$$\omega = \omega(nJ \to n'J'),$$

而约化矩阵元的平方为

$$|\langle n'J'IF' \| d \| nJIF\rangle|^2 = (2F+1)(2F'+1) \times \begin{Bmatrix} J' & F' & I \\ F & J & 1 \end{Bmatrix}^2 |\langle n'J' \| d \| nJ\rangle|^2. \tag{49.19}$$

## 习 题

碱金属光谱中的大部分谱线可以描述成一个外层电子(光电子) 在原子的其余部分(形成闭合组态)的自洽场中跃迁的结果, 原子的状态按 $LS$ 耦合决定. 在这些条件下, 试确定光谱线精细结构分量的相对强度.

**解** 原子的总角动量 $L$ 和 $S=1/2$ 等于光电子的轨道角动量和自旋. 所以, 状态的宇称等于 $(-1)^L$ (原子其余部分闭合组态的宇称为正). 所以, 宇称选择定则禁止 $L'=L$ 的偶极跃迁, 因而只可能发生 $L'-L=\pm 1$ 的跃迁. 由于 $J$ 的选择定则, 双线能级 $n, L$ 和 $n'$, $L-1$ 分量之间的跃迁共给出三条谱线 (图 1), 它们的相对强度(记作 $a, b, c$) 可根据(49.16)确定[而不直接采用公式(49.15)],按初态(或终态)划分谱线,不同初态(或终态)谱线的总强度之比给出两个方程:

$$\frac{b+c}{a}=\frac{2L}{2L+2}, \quad \frac{a+b}{c}=\frac{2L}{2L-2},$$

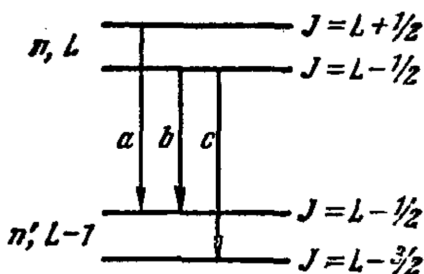



图 1

由此得出

$$a:b:c=[(L+1)(2L-1)]:1:[(L-1)(2L+1)].$$

如果 $L=1$, 较低能级不分裂, 谱线 $c$ 不会出现, 因而, $a/b=2$.

## § 50. 原子辐射: 磁型

原子磁矩的数量级等于玻尔磁子: $\mu=e\hbar/mc$. 它和电偶极矩 ($d\sim ea\sim \hbar^2/me$) 的数量级相差一个因子 $\alpha$(因为 $v/c\sim\alpha$, 所以 $\mu\sim dv/c$,这正是所期待的). 由此得出,原子的磁偶极($M1$)辐射的几率大约是同频率的电偶极辐射几率的$1/\alpha^2$. 所以,实际上只对那些电辐射选择定则所禁止的跃迁,磁辐射才是重要的.

至于电四级($E2$)辐射, 它的几率和 $M1$ 辐射几率之比的数量级为

$$\frac{E2}{M1}\sim\frac{(ea^2)^2\omega^2/c^2}{\mu^2}\sim\frac{a^4m^2\omega^2}{\hbar^2}\sim\left(\frac{\Delta E}{E}\right)^2 \qquad (50.1)$$

(四极矩$\sim ea^2$, $E\sim\hbar^2/ma^2$ 为原子能量, $\Delta E$为跃迁时能量的改变). 我们看到, 对于平均原子频率(即 $\Delta E\sim E$ 时), $E2$ 和 $M1$ 辐射的几率具有同一数量级(当然, 假定两者都是选择定则所容许的). 如果$\Delta E\ll E$ (例如, 对于同一原子项的精细结构分量之间的跃迁), 那么 $M1$ 辐射的几率比 $E2$ 辐射的大.

磁偶极跃迁服从严格的选择定则

$$|J'-J|\leqslant 1\leqslant J+J', \tag{50.2}$$

$$PP'=1. \tag{50.3}$$

在 $LS$ 耦合情形下, 有比电情形中更具约束性的附加选择定则. 这种情况与系统中因所有粒子(电子)的全同性而产生的原子磁矩的特殊性质有关, 也就是说, 原子磁矩算符可以通过它的总轨道角动量和自旋角动量算符表示:

$$\hat{\boldsymbol{\mu}}=-\mu_0(\hat{\boldsymbol{L}}+2\hat{\boldsymbol{S}})=-\mu_0(\hat{\boldsymbol{J}}+\hat{\boldsymbol{S}}), \tag{50.4}$$

式中 $\mu_0=|e|\hbar/2mc$ 为玻尔磁子 (参看第三卷 §113). 由于总角动量守恒, 算符$\hat{\boldsymbol{J}}$ 一般只具有能量的对角矩阵元, 因而在辐射理论中仅写出$\hat{\boldsymbol{\mu}}=-\mu_0\hat{\boldsymbol{S}}$ 就行了①.

当忽略自旋-轨道相互作用时, 角动量$\hat{\boldsymbol{L}}$ 和$\hat{\boldsymbol{S}}$ 分别都是守恒的. 因而, 自旋算符对表征非分裂项的所有量子数$nSL$都是对角化的. 为了使跃迁确能发生, 必须改变量子数 $J$. 因此, 我们有选择定则:

$$n'=n,\quad S'=S,\quad L'=L\quad J'-J=\pm 1, \tag{50.5}$$

就是说, 跃迁只可能发生在同一原子项的精细结构分量之间.

在这种情形下, 发射几率可以精确地进行计算. 适当改变公

---

① 例外情形发生在原子的电子角动量 $J$ 不守恒的情形中, 即: 当考虑超精细结构时, 当有外场时, 等等(参看习题).

式(49.10)中的符号，我们有

$$w(nLSJ\to nLSJ')=\frac{4\omega^3\mu_0^2}{3\hbar c^3}(2J'+1)\begin{Bmatrix}S & J' & L\\ J & S & 1\end{Bmatrix}|\langle S\|S\|S\rangle|^2.$$

这里所包含的自旋对其本征函数的约化矩阵元为

$$\langle S\|S\|S\rangle=\sqrt{S(S+1)(2S+1)} \tag{50.6}$$

[参看第三卷(29.13)]. 我们所需要的 $6j$ 符号等于

$$\begin{Bmatrix}S & J-1 & L\\ J & S & 1\end{Bmatrix}^2$$

$$=\frac{(L+S+J+1)(L+S-J+1)(L-S+J)(S-L+J)}{S(2S+1)(2S+2)(2J-1)2J(2J+1)} \tag{50.7}$$

(参看第三卷 § 108的表). 结果得到

$$\begin{aligned}&w(nLSJ\longrightarrow nLS,J-1)\\&=\frac{2J+1}{2J-1}w(nLS,\ J-1\longrightarrow nLSJ)\\&=\frac{\omega^3\mu_0^2}{3\hbar c^3(2J+1)J}(L+S+J+1)(L+S-J+1)\\&\times(J+S-L)(J+L-S).\end{aligned} \tag{50.8}$$

同一能级的超精细结构分量之间的跃迁（其频率在无线电波范围内）一般不会是电偶极跃迁，因为这些分量都具有同样的宇称. $E2$ 和 $M1$ 跃迁毋须改变宇称. 然而由于超精细结构间隔非常小，和 $M1$ 相比，$E2$ 辐射的几率很小[比较式(50.1)]，因而上述跃迁都是作为磁偶极跃迁实现的.

## 习　题

1. 求同一能级的超精细结构分量之间的 $M1$ 跃迁的几率.

**解**　跃迁几率由公式(49.18)和 (49.19)给出. 在这两个公式中现在将出现磁矩的对角化约化矩阵元 $\langle nJ\|\mu\|nJ\rangle$，其值可以直接写出来，因为总的

(非约化的)矩阵元$\langle nJM|\mu_z|nJM\rangle$正好决定了该能级在塞曼效应中的分裂(参看第三卷 § 113)且等于 $-\mu_0 gM$($g$ 为兰德因子)。约化矩阵元为[参看第三卷(29.7)]

$$\langle nJ\|\mu\|nJ\rangle=\frac{1}{M}\sqrt{J(J+1)(2J+1)}\langle nJM|\mu_z|nJM\rangle$$
$$=-\mu_0 g\sqrt{J(J+1)(2J+1)}.$$

结果,我们得到所求的几率[①]:

$$w(nJIF\longrightarrow nJI,\ F-1)=\frac{2F+1}{2F-1}w(nJI,F-1\longrightarrow nJIF)$$
$$=\frac{\omega^3\mu_0^2 g^2}{3\hbar c^3(2F+1)F}(J+I+F+1)(J+I-F+1)(F+J-I)(F-J+I).$$

此式与式(50.8)的区别仅仅是符号的改变,并多了一个因子 $g^2$.

2. 求同一原子能级的塞曼分量之间的 $M1$ 跃迁几率.

**解** 这是指 $n$, $J$ 值都不变时的 $M\longrightarrow M-1$ 跃迁. 跃迁频率为[参看下面的(51.3)]: $\hbar\omega=\mu_0 gH$($g$ 为兰德因子). 矢量 $\boldsymbol{\mu}$ 的球分量 $\mu_{-1}$ 的矩阵元为

$$|\langle nJ\ M-1|\mu_{-1}|nJM\rangle|=\sqrt{\frac{(J-M+1)(J+M)}{2J(J+1)(2J+1)}}|\langle nJ\|\mu\|nJ\rangle|=$$
$$=-\mu_0 g\sqrt{\frac{1}{2}(J-M+1)(J+M)}$$

[参看第三卷(27.12)和上题]. 跃迁几率为

$$w=\frac{4\omega^3}{3\hbar c^3}|\langle nJ,\ M-1|\mu_{-1}|nJM\rangle|^2=\frac{2\mu_0^5 H^3}{3\hbar^4 c^3}(J-M+1)(J+M).$$

## § 51. 原子辐射:塞曼效应和斯塔克效应

在外磁场 $H$(假定它很弱)中,每一个总角动量为 $J$ 的原子能级分裂成 $2J+1$ 个能级

---

① 氢原子的基态能级($1s_{1/2}$)的超精细结构分量之间的跃迁是一个有趣的例子. 在这里,$E1$ 跃迁和 $E2$ 跃迁是严格禁止的(后者是由于禁止 $J+J'=1$ 的四极跃迁的选择定则). 这个跃迁的频率是 $\omega=2\pi\times1.42\times10^9$ 秒$^{-1}$(波长 $\lambda=21$ 厘米). 设 $g=2$, $I=1/2$, $J=1/2$, $F=1$, $F'=0$, 我们得到

$$w=\frac{4\omega^3\mu_0^2}{3\hbar c^3}=2.85\times10^{-15}\text{秒}^{-1}.$$

$$E_M=E^{(0)}+\mu_0 gMH, \tag{51.1}$$

式中$E^{(0)}$为非微扰能级，$\mu_0$为玻尔磁子，$g$为兰德因子，$M$为角动量$J$在磁场方向上的分量(参看第三卷§113)．因此，角动量方向上的简并被完全消除．

因两个分裂能级之间的跃迁而产生的谱线也相应地发生分裂．谱线的分量数由量子数$M$的选择定则决定．按照这个定则，偶极辐射时应该有

$$m=M-M'=0,\ \pm 1. \tag{51.2}$$

此外，如果$J'=J$，则$M=M'=0$的跃迁也是禁止的．这一点可以从第三卷中任意矢量的矩阵元的一般表达式(29.7)直接看出来．

由$m=0$和$m=\pm 1$的跃迁所产生的分量分别叫做$\pi$分量和$\sigma$分量，它们的频率是

$$\begin{aligned}\hbar\omega_\pi&=\hbar\omega^{(0)}+\mu_0 H(g-g')M,\\ \hbar\omega_\sigma&=\hbar\omega^{(0)}+\mu_0 H[gM-g'(M\pm 1)].\end{aligned} \tag{51.3}$$

在$g=g'$的特殊情形下，我们有

$$\hbar\omega_\pi=\hbar\omega^{(0)},\qquad \hbar\omega_\sigma=\hbar\omega^{(0)}\mp\mu_0 gH, \tag{51.4}$$

与$M$之值无关．所以在这种情形下，谱线分裂成三重线：$\pi$分量在原来位置，而两个$\sigma$分量对称地分布在它的两边（所谓正常塞曼效应)．

在所有方向上辐射的总几率正比于模的平方$|\langle n'J'M'|d_{-m}|nJM\rangle|^2$．所以，利用$j=1$的公式(46-19)可知，光谱线的每个塞曼分量的相对辐射几率等于

$$\begin{pmatrix}J' & 1 & J\\ M' & m & -M\end{pmatrix}^2. \tag{51.5}$$

在“正常”塞曼效应的特殊情形下，总共有三个分量，每一个分量都是在$m$给定的条件下由$M$的一切初值跃迁产生的．由于

$$\sum_{MM'}\begin{pmatrix} J' & 1 & J \\ M' & m & -M \end{pmatrix}^2 = \frac{1}{3} \tag{51.6}$$

[参看第三卷式(106.12)]，所以，在这种情形下，三个分量的辐射都是等几率的.

然而，当在特定方向(相对于辐射源所在处的外磁场方向)上进行观察时，我们的最大兴趣在于塞曼分量的相对强度. 按照公式(45.5)，在已知方向 $\boldsymbol{n}$ 上的辐射几率(也是相应的谱线强度)与 $\Sigma|\boldsymbol{e}^*\cdot\boldsymbol{d}_{fi}|^2$ 成正比. 在这里，求和是对已知 $\boldsymbol{n}$ 的两个独立的极化 $\boldsymbol{e}$ 进行.

沿着场($z$ 轴)观察时，这个和是

$$|(d_x)_{fi}|^2+|(d_y)_{fi}|^2,$$

或者写成球分量

$$|(d_1)_{fi}|^2+|(d_{-1})_{fi}|^2.$$

这意味着在纵的(沿着场)方向上只能观察到两个 $\sigma$ 分量($m=\pm1$)，它们的强度正比于

$$\begin{pmatrix} J' & 1 & J \\ M\mp1 & \pm1 & -M \end{pmatrix}^2. \tag{51.7}$$

这两条谱线具有确定的 $m$ 值(角动量在传播方向上的投影值)，一为右旋($m=1$)圆极化，一为左旋($m=-1$)圆极化(参看§8).

在垂直于场的方向(例如沿 $x$ 轴)观察时，谱线强度正比于和

$$|(d_z)_{fi}|^2+|(d_y)_{fi}|^2=|(d_0)_{fi}|^2+\frac{1}{2}\{|(d_1)_{fi}|^2+|(d_{-1})_{fi}|^2\}.$$

因此，在横的方向上观察到两个 $\sigma$ 分量和一个 $\pi$ 分量，它们的强度分别正比于

$$\frac{1}{2}\begin{pmatrix} J' & 1 & J \\ M\mp1 & \pm1 & -M \end{pmatrix}^2 \text{和} \begin{pmatrix} J' & 1 & J \\ M & 0 & -M \end{pmatrix}^2 \tag{51.8}$$

($\sigma$ 分量的强度是纵向观察时的1/2). $\pi$ 分量沿 $z$ 轴线极化，而在

这个方向上观察到的$\sigma$分量是沿$y$轴线极化的.

我们看到，塞曼分量的相对强度完全取决于$J$和$M$的初值和终值，而与能级的其它性质无关.

选择定则禁止同一能级的塞曼分量之间的电偶极跃迁，因为它们都具有相同的宇称. 这些跃迁是作为磁偶跃迁实现的，其原因和上节末对能级超精细结构分量之间的跃迁所述相同. 由于数$M$的选择定则，跃迁只发生在相邻的分量之间$(M'-M=\pm1)$①.

原子能级在弱电场中的分裂(**斯塔克效应**)不同于在磁场中的分裂，它不能完全消除角动量方向上的简并. 除了$M=0$以外的所有能级仍然是二重简并的：每一个能级都有角动量分量为$M$和$-M$的两个状态.

光谱线斯塔克分量的相对强度的计算与上面对塞曼效应所讲的完全类似②. 这时必须注意，$\pi$分量的强度中包含着($M\neq0$时)$M\to M$和$-M\to-M$跃迁的贡献，$\sigma$分量的强度中包含着$M\to M\pm1$和$-M\to-(M\pm1)$跃迁的贡献. 因此，当对效应进行横向观察时，$\pi$分量的强度正比于

$$2\begin{pmatrix} J' & 1 & J \\ M & 0 & -M \end{pmatrix}^2,$$

而$\sigma$分量的强度正比于

$$\frac{1}{2}\begin{pmatrix} J' & 1 & J \\ M\pm1 & \mp1 & -M \end{pmatrix}^2+\frac{1}{2}\begin{pmatrix} J' & 1 & J \\ -M\mp1 & \pm1 & M \end{pmatrix}^2$$

$$=\begin{pmatrix} J' & 1 & J \\ M\pm1 & \mp1 & -M \end{pmatrix}^2$$

(请记住，第二行的所有量子数改变符号时，$3j$符号只可能变号，因

① 这些跃迁的频率一般在厘米波段，可以在吸收和受激辐射(电子顺磁共振)中观察到；吸收原子处于恒定强磁场(产生塞曼劈裂的磁场)和共振频率的弱射频场中.

② 这里所指的是一切原子(氢除外)所固有的二次斯塔克效应(参看第三卷§76). 假定场很弱，它所引起的能级分裂甚至比精细结构间隔还小.

而它们的平方不变).

在外场中(哪怕是很弱的外场),总角动量 $J$ 不再严格守恒;在均匀场中,只有角动量分量$M$是严格守恒的. 所以,在弱场中发生辐射跃迁时,角动量守恒不是被严格遵守的,在原子光谱中可能出现通常的选择定则所禁止的一些谱线.

这些谱线强度的计算,等价于计算偶极矩矩阵中的修正,这又要求确定对定态波函数的修正.在微扰论的第一级近似中(对弱外场而言),波函数中出现了由非零微扰矩阵元(在电场中为$-\boldsymbol{E}\cdot\boldsymbol{d}$)与初态相联系的一些态的"混合":在一个态 $\psi_1$ 中混入了另一个态 $\psi_2$:

$$\frac{-\boldsymbol{E}\cdot\boldsymbol{d}_{21}}{E_1-E_2}\psi_2.$$

结果,在"禁戒"跃迁的矩阵元中出现了一项

$$\frac{-(\boldsymbol{E}\cdot\boldsymbol{d}_{21})\boldsymbol{d}_{32}}{E_1-E_2},$$

如果由"中间态" 2 跃迁到初态 1 和终态 3 是容许的, 这一项便不等于零.

## § 52. 原子辐射: 氢原子

氢原子是唯一能够完全用解析方法计算跃迁矩阵元的例子(W. Gordon, 1929).

氢原子状态的宇称等于 $(-1)^l$, 可以由电子的轨道角动量唯一地决定(决定状态宇称的量子数 $l$ 在精确的相对论性波函数中,即考虑自旋-轨道相互作用时,仍然有意义). 所以,宇称选择定则严格禁止没有 $l$ 变化的电偶极跃迁, 只有 $l\to l\pm1$ 的跃迁才是可能的. 主量子数 $n$ 的改变不受限制.

氢原子的偶极矩等价于电子的矢径: $\boldsymbol{d}=e\boldsymbol{r}$. 由于氢原子中

电子的波函数是角度部分和径向函数 $R_{nl}$ 之积，所以，矢径的约化矩阵元也可以写成积的形式：

$$\langle n', l-1\|r\|nl\rangle=\langle l-1\|\nu\|l\rangle\int_0^\infty R_{n', l-1}rR_{nl}r^2\mathrm{d}r,$$

式中 $\langle l-1\|\nu\|l\rangle$ 是 $r$ 方向上的单位矢量 $\nu$ 的约化矩阵元，它等于

$$\langle l-1\|\nu\|l\rangle=\langle l\|\nu\|l-1\rangle^*=\mathrm{i}\sqrt{l}$$

[参看第三卷(29.14)]．所以，

$$\langle n', l-1\|r\|nl\rangle=-\langle nl\|r\|n', l-1\rangle=\mathrm{i}\sqrt{l}\int_0^\infty R_{n', l-1}R_{nl}r^3\mathrm{d}r. \tag{52.1}$$

氢原子分立谱的非相对论性径向函数由第三卷的公式(36 13)给出①：

$$R_{nl}=\frac{2}{n^{l+2}(2l+1)!}\sqrt{\frac{(n+l)!}{(n-l-1)!}}\times(2r)^l e^{-r/n}F\left(-n+l+1, 2l+2, \frac{2r}{n}\right). \tag{52.2}$$

含有两个合流超几何函数之积的积分(52.1)，可以利用第二卷 § f 中所导出的公式计算②，结果是

$$\langle n', l-1\|r\|nl\rangle$$
$$=\mathrm{i}\sqrt{l}\frac{(-1)^{n'-1}}{4(2l-1)!}\sqrt{\frac{(n+l)!(n'+l-1)!}{(n-l-1)!(n'-l)!}}$$
$$\times\frac{(4nn')^{l+1}(n-n')^{n+n'-2l-2}}{(n+n')^{n+n'}}$$
$$\times\left\{F\left(-n+l+1, -n'+l, 2l', -\frac{4nn'}{(n-n')^2}\right)\right.$$

① 本节采用原子单位．在通常的单位中，下面所写出的坐标矩阵元的表达式应该乘以 $\hbar^2/me^2$(如果是原子序数为 $Z$ 的类氢离子，则应乘以 $\hbar^2/mZe^2$)．

② 在那里所用的符号中，需要计算积分 $J_{2l+2}^{1, 2}(-n+l+1, -n'+l)$，这个积分的完成用了公式($f$, 12)—($f$, 16)．

$$-\left(\frac{n-n'}{n+n'}\right)^2 F\left(-n+l-1,-n'+l,2l,-\frac{4nn'}{(n-n')^2}\right)\Bigg\},$$

(52.3)

式中 $F(\alpha,\beta,\gamma,z)$ 为超几何函数，由于参数 $\alpha$, $\beta$ 此时为负整数或零，所以这些函数化为多项式①.

在某些特殊情形中，根据公式(52.3) 可以得到如下表达式($l$ 值用光谱符号 $s, p, d,$ ……表示)：

$$|\langle 1s\|r\|np\rangle|^2=\frac{2^8 n^7(n-1)^{2n-5}}{(n+1)^{2n+5}},$$

$$|\langle 2s\|r\|np\rangle|^2=\frac{2^{17} n^7(n^2-1)(n-2)^{2n-6}}{(n+2)^{2n+6}},$$

$$|\langle 2p\|r\|nd\rangle|^2=\frac{2^{19} n^9(n^2-1)(n-2)^{2n-7}}{3(n+2)^{2n+7}}, \qquad (52.4)$$

$$|\langle 2p\|r\|ns\rangle|^2=\frac{2^{15} n^9(n-2)^{2n-6}}{3(n+2)^{2n+6}}.$$

公式(52.3) 不适用于主量子数 $n$ 不变的跃迁(能级的精细结构分量之间的跃迁). 为了在这种情形下 ($n=n'$) 进行积分，我们把径向函数表示成广义拉盖尔多项式：

$$R_{nl}=-\frac{2}{n^2}\sqrt{\frac{(n-l-1)!}{[(n+l)!]^3}}\,e^{-r/n}\left(\frac{2r}{n}\right)^l L_{n+l}^{2l+1}\left(\frac{2r}{n}\right). \qquad (52.5)$$

在积分

$$\int_0^\infty R_{n,l-1}R_{nl}r^3 dr \backsim \int_0^\infty e^{-\rho}\rho^{2l+2}L_{n+l}^{2l+1}(\rho)\,L_{n+l-1}^{2l-1}(\rho)\,d\rho$$

中，我们把其中的一个多项式用母函数表达(参看第三卷 § d)：

$$L_{n+1}^{2l+1}(\rho)=-\frac{(n+l)!}{(n-l-1)!}e^{\rho}\rho^{-2l-1}\left(\frac{d}{d\rho}\right)^{n-l-1}e^{-\rho}\rho^{n+l}.$$

---

① 氢的跃迁矩阵元和跃迁几率的数表可以在下列书中找到：Бете Г., Солпитер Э. "单电子和双电子原子的量子力学"——М. Изб-во иностр. книг., 1960. 或 H. A. Bethe and E. E. Salpeter, "*Handbuch der Physik*" 35, 88-436, Springer, Berlin 1957.

$(n-l-1)$次分部积分后，我们得到如下积分：

$$\int_0^\infty e^{-\rho}\rho^{n+l}\left(\frac{d}{d\rho}\right)^{n-l-1}\rho L_{n+l-1}^{2l-1}(\rho)d\rho,$$

在这个积分中可以利用公式把拉盖尔多项式写成显函数形式：

$$L_n^m(\rho)=(-1)^m n!\sum_{k=0}^{n-m}\binom{n}{m+k}\frac{(-\rho)^k}{k!}.$$

求和号下进行微分后，只剩下三项初等积分. 计算给出简单的结果：

$$\langle n, l-1\|r\|nl\rangle=i\sqrt{l}\cdot\frac{3}{2}n\sqrt{n^2-l^2}. \tag{52.6}$$

积分

$$\int_0^\infty R_{n',l-1}R_{nl}r^3dr=\int_0^\infty \chi_{n',l-1}(r\chi_{nl})dr$$

(式中 $\chi_{nl}=rR_{nl}$)是函数$r\chi_{nl}$按照正交函数系$\chi_{n',l-1}(n'=1, 2, \cdots)$展开的系数. 这些系数的模的平方和等于被展函数平方的积分①. 所以

$$\sum_{n'}|\langle n', l-1\|r\|nl\rangle|^2=l\int_0^\infty r^2\chi_{nl}^2dr. \tag{52.7}$$

利用状态$nl$中$r^2$的均方表达式[参看第三卷式(36.16)]，我们得到如下的求和法则：

$$\sum_{n'}|\langle n', l-1\|r\|nl\rangle|^2=l\frac{n^2}{2}[5n^2+1-3l(l+1)]. \tag{52.8}$$

在$n, l$已知且$n'$值较大的条件下，$nl\to n'l'$的跃迁矩阵元按如下规律衰减：

$$|\langle n'l'\|r\|nl\rangle|^2\propto\frac{3}{n'^3}, \tag{52.9}$$

这可从特殊表达式(52.4)，也可从一般公式(52.3)看出来. 这个结

① 求和既可以对分立谱的状态进行，也可以对连续谱的状态进行.

果是理所当然的：当 $n'$ 较大时，库仑能级 $E'=-1/2n'$ 的分布几乎是连续的，跃迁到间隔 $dE'$ 内的能级上的跃迁几率跟这些能级的分布密度成正比，而能级的分布密度又正比于 $n'^{-3}$.

氢中的斯塔克效应有其独特性(第三卷 § 77)：能级分裂与电场的一次幂成正比. 这时认为，一方面场很弱(弱到可以应用微扰论)，另一方面又能使能级的分裂比精细结构大. 在这些条件下，角动量的大小一般是不守恒的. 能级将按照抛物线量子数 $n_1, n_2$, $m$ 来分类. 磁量子数 $m$ 仍然用来决定轨道角动量在 $z$ 轴(场方向)上的分量，当忽略自旋-轨道相互作用时，这个分量是守恒的. 因此，对磁量子数 $m$ 仍有通常的选择定则

$$m'-m=0, \pm 1, \qquad (52.10)$$

$n_1$ 和 $n_2$ 的变化是不受限制的.

偶极矩的矩阵元在共焦抛物面坐标中也可以用解析法计算，但所得到的公式太繁，这里我们就不再进行推导了①.

## 习　题

1. 求氢能级的斯塔克分裂，假设分裂比精细结构间隔小(但又比兰姆移动大).

**解**　在所给条件下，只剩下 $l=j\pm 1/2$ 非微扰能级的二重简并. 所以，斯塔克分裂在场中又是线性的. 分裂的大小 $\Delta$ 可以根据久期方程决定:

$$\begin{vmatrix} -\Delta & -E(d_z)_{12} \\ -E(d_z)_{21} & -\Delta \end{vmatrix}=0, \qquad \Delta=\pm E|(d_z)_{12}|$$

(指标 1, 2 对应着 $l=j\pm 1/2$ 和给定磁量子数 $m$ 的状态，微扰 $V=-Ed_z$ 对于 $m$ 是对角化的，对于 $l$ 则没有对角元素). 轨道量 $d_z$ 的矩阵元可以利用第三卷的公式(29.7)和(109.3)计算:

$$\langle j, l-1, m|d_z|jlm\rangle=\frac{m}{\sqrt{j(j+1)(2j+1)}}\langle j, l-1\|d\|jl\rangle,$$

① 这些公式和相应的数表，请参看前面所指出的 Г. Бете 和 Э. Солпитер 的书.

$$\langle j, l-1\|d\|jl\rangle = -(2j+1)\begin{Bmatrix} l-1 & j & 1/2 \\ j & l & 1 \end{Bmatrix}\langle l-1\|d\|l\rangle,$$

并且必须假设 $l=j+1/2$. 量$\langle l-1\|d\|l\rangle$根据公式(52.6)取值. 结果为

$$\Delta=\pm\frac{3}{4}\sqrt{n^2-(j+1/2)^2}\frac{nm}{j(j+1)}E.$$

2. 试决定氢原子在跃迁 $2s_{1/2}\longrightarrow 1s_{1/2}$ 中发射光子的几率 (G. Breit, E. Teller, 1940).

**解** 对$E1$跃迁, 这个过程是宇称选择定则严格禁止的; 对$E2$跃迁, 这个过程是选择定则(46.15)严格禁止的. 因此, 应该考虑$M1$跃迁, 其跃迁几率由式(47.5)所示. 但是, 在现情形下($l=0$), 磁矩是纯粹的自旋量, 当忽略自旋-轨道相互作用时, 其矩阵元为零, 因为不同主量子数的轨道波函数互相正交. 这意味着为了得到非零的答案, 泡利方程的近似法已显不够, 还必须由完全的狄拉克方程出发讨论.

在波函数的标准表象中, 跃迁流为①

$$j_{fi}=\psi_f^*\alpha\psi_i=\varphi_f^*\sigma\chi_i+\chi_f^*\sigma\varphi_i.$$

根据式(35.1), (24.2), (24.8), 状态 $l=0, j=1/2$ 的波函数为

$$\psi=\begin{pmatrix}\varphi\\ \chi\end{pmatrix}=\frac{1}{4\pi}\begin{pmatrix} f(r)w(m) \\ -ig(r)(\sigma\cdot n)w(m)\end{pmatrix},$$

式中 $n=r/r$, 而 $w(m)$ 为三维实单位旋量, 与自旋分量值$m$相对应. 所以

$$j_{fi}=\frac{1}{4\pi i}\{f_fg_iw_f\sigma(\sigma\cdot n)w_i-g_ff_iw_f(\sigma\cdot n)\sigma w_i\}.$$

将此式代入(47.4)并对方向 $n$ 积分, 我们得到

$$\mu_{fi}=-\frac{e}{6i}w_f(\sigma\times\sigma)\ w_iI=-\frac{e}{3}w_f\sigma w_iI$$

(根据泡利矩阵的对易规则: $\sigma\times\sigma=2i\sigma$); 在这里

$$I=\int_0^\infty(f_fg_i+f_ig_f)r^3\mathrm{d}r. \tag{1}$$

光子的发射几率(47.5)对 $m_f$ 求和后得

$$w=\frac{4e^2\omega^3}{27}w_i\ \sigma^2w_iI^2=\frac{4e^2\omega^3}{9}I^2. \tag{2}$$

根据式(35.4)我们有(当 $\kappa=-1$ 时)

$$g=\frac{f'}{\varepsilon+m+\alpha/r}\approx\frac{f'}{2m}-\left(\varepsilon-m+\frac{\alpha}{r}\right)\frac{R'}{4m^2};$$

① 本题中我们采用相对论单位.

在第二项中，精确函数 $f$ 由非相对论性径向函数 $R$ 代替. 如果取近似 $g=R'/2m$, 由于函数 $R_f$ 和 $R_i$ 正交, 积分

$$I=\frac{1}{2m}\int_0^\infty (R_fR_i)'r^3\mathrm{d}r=-\frac{3}{2m}\int_0^\infty R_fR_ir^2\mathrm{d}r=0, \qquad (3)$$

在后面的近似中，考虑到(3),

$$I=\frac{1}{2m}\int_0^\infty (f_ff_i)'r^3\mathrm{d}r+\frac{1}{4m^2}\int\left\{R_f'R_i(\varepsilon_i-\varepsilon_f)-\frac{\alpha}{r}(R_fR_i)'\right\}r^3\mathrm{d}r. \qquad (4)$$

由精确函数 $\psi_i$ 和 $\psi_f$ 的正交性，我们有(设 $\kappa_i=\kappa_f$)

$$\int_0^\infty (f_if_f+g_ig_f)r^2\mathrm{d}r=0,$$

进行分部积分后，(4)中的第一项可以改写成

$$-\frac{3}{2m}\int_0^\infty f_ff_ir^2\mathrm{d}r=\frac{3}{2m}\int_0^\infty g_fg_ir^2\mathrm{d}r\approx\frac{3}{8m^3}\int_0^\infty R_f'R_i'\,r^2\mathrm{d}r.$$

因为函数

$$R_f=2(m\alpha)^3\mathrm{e}^{-m\alpha r},\ R_i=\frac{(m\alpha)^3}{\sqrt{2}}\left(1-\frac{m\alpha r}{2}\right)\mathrm{e}^{-m\alpha r/2}$$

(参看第三卷 § 36)，能量差

$$\omega=\varepsilon_i-\varepsilon_f=\frac{m\alpha^2}{2}\left(1-\frac{1}{2^2}\right)=\frac{3}{8}m\alpha^2\,,$$

积分计算给出 $I=2^{3/2}\alpha^2/9m$. 由此得出跃迁几率(通常的单位)

$$w=\frac{2^5\alpha^5\hbar^2\omega^3}{3^6m^2c^4}=\frac{mc^2\alpha^{11}}{2^4\cdot 3^3\hbar}=5.6\cdot 10^{-6}\ 秒^{-1}.$$

$2s_{1/2}$ 态的寿命很长. 事实上，同时发射两个光子的发光几率要大得多[参看 § 59 的(269页)注②].

## § 53. 双原子分子的辐射: 电子光谱

分子光谱的特征，首先是由于分子能量由大到小分为电子能量、振动能量和转动能量三部分. 双原子分子的能级结构在第三卷第十一章中已经详细研究过了，现在我们来阐述这种能级结构产生的光谱图，并计算谱线强度①.

① 下面的阐述基于第三卷 § 78, § 82— § 88 各节. 为简洁起见，我们将不再频繁地引证这些章节.

我们首先讨论一般情况：分子的电子态在跃迁时改变，一般说来，同时还伴有振动态和转动态的改变. 这种跃迁的频率处在光谱的可见区和紫外区. 它们的总体叫做分子的**电子光谱**. 我们将总是考虑电偶极跃迁. 其它类型的跃迁在分子光谱学中一般是不重要的.

和任何系统中的偶极跃迁一样，分子的总角动量 $J$ 也遵守如下的选择定则：

$$|J'-J|\leqslant 1\leqslant J+J'. \tag{53.1}$$

在现在的情形下，系统宇称的严格的选择定则相当于能级符号的选择定则. 用分子光谱学中常用的术语来说，在反演时(即电子或原子核的坐标改变符号时) 波函数不改变符号的状态叫**正**状态，改变符号的叫**负**状态. 因此，我们有严格的定则：

$$+\rightarrow-,\ -\rightarrow+. \tag{53.2}$$

如果分子由相同原子(其核为同一同位素)组成，按交换原子核坐标时波函数的对称性质，能级可分为对称能级($s$)和反对称能级($a$). 前者的波函数对这种变换不改变符号，后者的波函数改变符号. 由于电偶极矩算符不受这种变换的影响，所以只对不改变这种对称性的跃迁

$$s\rightarrow s,\qquad a\rightarrow a, \tag{53.3}$$

它的矩阵元才不为零①. 但是，由于能级的对称性取决于分子中核的总自旋 $I$ 的取值，这个法则并不是绝对严格的. 由于原子核的自旋与电子的相互作用十分微弱，自旋 $I$ 的守恒性很好，但仍然不是严格的. 当考虑这种相互作用时，$I$ 将不具有确定值，对称性( $s$ 或 $a$ )不再保持，选择定则(53.3)也就不再适用.

由相同原子组成的分子的电子项也可以用它们的**宇称**（ $g$ 或

---

① 显然，这个法则也适用于任一多极跃迁.

$u$)描述，即用核坐标保持不变而电子坐标(由分子中心算起)改变符号时波函数的行为描述．电子项的这种性质一方面与原子核的对称性密切相关，另一方面又与属于这个电子项的转动能级的符号存在紧密的联系．属于偶($g$)电子项的能级可以是$s+$或$s-$，而属于奇($u$)电子项的能级可以是 $s-$或 $a+$．因而由定则(53.2)或(53.3)还可以得到定则

$$g \to u, \qquad u \to g. \tag{53.4}$$

对于由同种元素的不同同位素组成的分子，定则(53.4)仍然近似成立．由于核电荷相等，当研究不动核的电子项时，这是一个处在具有对称中心（位于原子核连线中点上）的电场中的电子系统．电子波函数在对称中心反演时的对称性决定电子项的宇称．由于电偶极矩矢量在这种变换下改变符号，所以我们得到定则(53.4)．用这种方法所得到的定则仅仅是近似的，因为必须把原子核看成是不动的．因此，当考虑电子态和分子转动之间的相互作用时，定则将不再适用．

进一步的选择定则有赖于对分子中各种相互作用的相对大小(即分子的耦合类型)做某种具体的假设，因而这些定则只能是近似的．双原子分子的大多数电子项属于 $a$ 型耦合或 $b$ 型耦合．这两种耦合类型的特点是：轨道角动量与轴的耦合(分子中两个原子的电相互作用)比所有其它相互作用大，所以存在着量子数 $\Lambda$和 $S$(电子的轨道角动量在分子轴线上的分量和电子的总自旋)．轨道量(电子的轨道角动量)算符与自旋算符对易，因而

$$S'-S=0(\text{情形 } a, b). \tag{53.5}$$

量子数 $\Lambda$ 的改变服从选择定则

$$\Lambda'-\Lambda=0, \qquad \pm 1(\text{情形 } a, b), \tag{53.6}$$

对于 $\Lambda=0$ 的状态($\Sigma$项)之间的跃迁，还有附加定则

$$\Sigma^+ \to \Sigma^+, \qquad \Sigma^- \to \Sigma^-(\text{情形 } a, b) \tag{53.7}$$

(对于过分子轴线的平面内的反射，态 $\Sigma^+$和$\Sigma^-$的变换性质不同)．定则(53.6)、(53.7)是在固定于核上的坐标系中研究分子时得到的(参看第三卷§87)；定则(53.6)类似于原子中磁量子数的选择定则.

$a$ 型耦合和 $b$ 型耦合的区别在于“自旋-轴”相互作用能和转动能(转动能级之差)之间的关系．前者在情形 $a$ 中比较大，而在情形 $b$ 中则小得多．下面我们来分别研究这两种情形.

**情形 $a$.** 这时存在量子数 $\Sigma$——总自旋沿分子轴的分量(以及量子数 $\Omega=\Sigma+\Lambda$——总角动量的分量)．如果初态和终态二者都属于情形 $a$，就有定则

$$\Sigma'-\Sigma=0 \qquad (\text{情形 } a), \tag{53.8}$$

它是根据偶极矩与自旋的对易性得出的，这种对易性已在前面讲过．由式(53.6)和(53.8)得出①：

$$\Omega'-\Omega=0, \pm 1. \tag{53.9}$$

如果 $\Omega=\Omega'=0$，那么除了一般定则(53.1)外，$J'=J$ 的跃迁也是禁止的②：

$$J'-J=\pm 1 \qquad \text{当} \Omega=\Omega'=0 \text{时(情形} a). \tag{53.10}$$

我们来研究属于不同电子项($a$ 型)的任意两个确定的振动能级之间的跃迁．当考虑电子项的精细结构时，这两个能级都分裂成几个分量．根据(53.5)，两者的分裂数($2S+1$)必定相同．按照定则(53.8)，一个能级的每一个分量只跟 $\Sigma$ 值相同的另一能级的一个分量结合.

---

① 在情形 $c$(中轨道角动量与轴的耦合比“自旋-轨道”耦合要小)，量子数 $\Lambda$ 和 $\Sigma$ 不能单独存在，这时这个定则仍然成立.

② 这个定则类似于原子情形下当 $M=M'=0$ 时禁止 $J=J'$ 的跃迁(§51)，不过那里只有存在外场时才有意义．而这里此定则直接来源于后式(53.12)．因为 $J'+J+1$ 为奇数，当 $J'=J$ 时，3$j$符号$\begin{pmatrix} J' & 1 & J \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}$为零.

其次，我们取具有相同$\Sigma$的一对能级．它们的$\Omega$和$\Omega'$值（与$\Lambda$和$\Lambda'$一样）相差0或$\pm1$．当考虑转动时，其中的每一个都分裂成一系列能级，每个能级有不同的$J$值和$J'$值．$J$和$J'$的取值范围是$J\geqslant|\Omega|$，$J'\geqslant|\Omega'|$．跃迁几率对这些量子数的依赖关系可以按照一般的形式导出(H. Hönl, F. London, 1925).

跃迁$n\Lambda\Omega JM_J\longrightarrow n'\Lambda'\Omega'J'M'_J$（$n$代表除$\Omega$和$\Lambda$以外的电子项特征）的矩阵元等于

$$
\begin{aligned}
|\langle n'\Lambda'\Omega'J'M'_J|d_q|n\Lambda\Omega JM_J\rangle| &= \sqrt{(2J+1)(2J'+1)} \\
&\times\begin{pmatrix} J' & 1 & J \\ -\Omega' & q' & \Omega \end{pmatrix}\begin{pmatrix} J' & 1 & J \\ -M'_J & q & M_J \end{pmatrix}|\langle n'\Lambda'|\bar{d}_{q'}|n\Lambda\rangle|,
\end{aligned}
\tag{53.11}
$$

式中$d_q$和$\bar{d}_{q'}$分别为偶极矩矢量在静坐标系$xyz$和动坐标系$\xi\eta\zeta$（$\zeta$轴沿分子轴线）中的球分量．这个公式是利用第三卷(110.6)得到的．矩阵元$\langle n'\Lambda'|\bar{d}_{q'}|n\Lambda\rangle$与转动量子数$J, J'$无关，而仅仅依赖于电子项的特征（并且在此情况下也不依赖于量子数$\Sigma$①），所以在矩阵元的写法上略去了指标$\Omega'=\Lambda'+\Sigma$和$\Omega=\Lambda+\Sigma$.

$n\Lambda\Omega J\longrightarrow n'\Lambda'\Omega'J'$的跃迁几率正比于矩阵元(53.11)对$M'_J$求和以后的平方．利用第三卷的公式(106.12)，我们有

$$
\sum_{M'_J}\begin{pmatrix} J' & 1 & J \\ -M'_J & q & M_J \end{pmatrix}^2=\frac{1}{2J+1},
$$

因而

$$
\begin{aligned}
w(n\Lambda\Omega J\to n'\Lambda'\Omega'J') &= (2J'+1) \\
&\times\begin{pmatrix} J' & 1 & J \\ -\Omega' & \Omega'-\Omega & \Omega \end{pmatrix}^2 B(n', n; \Lambda', \Lambda),
\end{aligned}
\tag{53.12}
$$

---

① 这一点的证明类似于第三卷§29开头对标量$f$所做的证明．在现在的情形下，矢量$\boldsymbol{d}$的算符与（在零级近似中）守恒的矢量$\boldsymbol{S}$的算符对易，而$\Sigma$是$\boldsymbol{S}$在转动坐标系中$\zeta$轴上的分量，在这个转动坐标系中，必须研究$\boldsymbol{d}$和$\boldsymbol{S}$的对易条件．

式中的系数 $B$ 不依赖于 $J, J'$（当然，我们忽略了具有不同 $J$、$J'$ 的跃迁频率的差别，这些差别相对说来是非常小的）①.

如果将公式(53.12)对 $J'$ 求和，则由于 $3j$ 符号的正交性[第三卷式(106.13)]，我们只得到 $B(n', n; \Lambda'\Lambda)$. 所以，由态 $\Omega$ 的转动能级 $J$ 跃迁到态 $\Omega'$ 的所有能级 $J'$ 的总几率与 $J$ 无关.

**情形 $b$:** 在这种情形下，除了总角动量 $J$ 以外，还存在着一个量子数 $K$ ——不考虑自旋时分子的角动量. 这个量子数的选择定则与任何轨道矢量(例如电偶极矩)的一般选择定则一样:

$$|K'-K| \leqslant 1 \leqslant K+K' \text{（情形 } b\text{）} \qquad (53.13)$$

并且当 $\Lambda=\Lambda'=0$ 时还禁止 $K=K'$ 的跃迁[类似(53.10)]:

$$K'-K=\pm 1 \quad \text{当} \Lambda=\Lambda'=0 \text{ 时}. \qquad (53.14)$$

对属于 $b$ 型的两个电子态的确定的振动能级，我们来考虑它们的转动分量之间的跃迁. 这种跃迁的几率由公式(53.12)决定，只是其中的 $J$、$\Omega$ 由 $K$、$\Lambda$ 代替. 当考虑精细结构时(对于 $S\neq 0$)，每一个转动能级 $K$ 分裂成 $2S+1$ 个分量: $J=|K-S|, \cdots, K+S$，结果，$J \longrightarrow J'$ 不再是一条谱线，而是多重谱线. 由于在这种情形下我们将 $\boldsymbol{K}$ 和 $\boldsymbol{S}$ 这两个自由的(未与分子轴线耦合的)角动量相加，多重线中不同谱线的相对跃迁几率公式与原子光谱中精细结构分量的对应公式(49.15)相同，在那里，相应的角动量(在 $LS$ 耦合中)是 $\boldsymbol{L}$ 和 $\boldsymbol{S}$.

这样，我们对双原子分子中可能出现的各种基本情形考察了选择定则，这些定则支配着在各种情形中会出现怎样的光谱线.

两个给定的电子-振动能级转动分量之间的跃迁产生的谱线

① 当考虑 $\Lambda$ 加倍时，所研究的每一个转动能级 $J$ 还要分裂成两个能级，其中一个是正的，另一个是负的. 这样，利用选择定则(53.2)，我们将有两个跃迁(而不再是 $J \to J'$ 一个跃迁): 由能级 $J$ 的正分量跃迁到能级 $J'$ 的负分量，以及由能级 $J$ 的负分量跃迁到能级 $J'$ 的正分量. 这两个跃迁的几率相等.

群，在光谱学中叫光谱带．由于转动能级的间隔很小，带中的谱线分布很密．这些谱线的频率由下式给出：

$$\hbar\omega_{JJ'}=\text{const}+BJ(J+1)-B'J'(J'+1), \qquad (53.15)$$

式中 $B, B'$ 为两个电子态中的转动常数（为简单起见，我们假设电子项是单谱线的）．当 $J'=J, J\pm1$ 时，公式(53.15)由三条抛物线分支表示(图2)．曲线上与整数 $J$ 对应的点决定频率值（图 2 中三条曲线的分布对应着 $B'<B$ 的情形．当 $B'>B$ 时，曲线的开放端指向 $\omega$ 值小的方向，而且最上面的曲线是 $J'=J-1$)①．由图可见，弯曲分支的存在使得指向一定极限位置（谱带头）的方向上谱线愈来愈密．

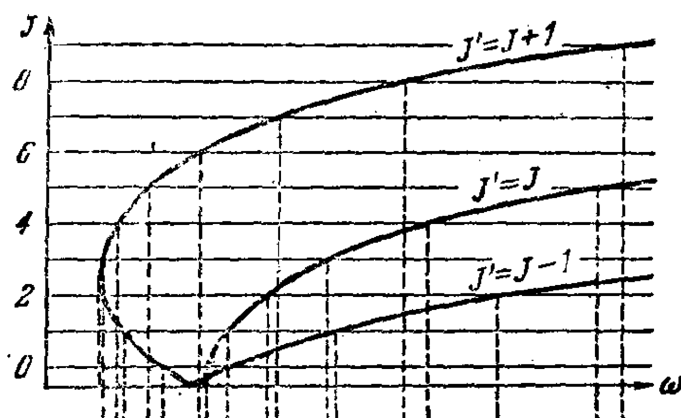



图 2

谈到谱线强度，还应该提及同核双原子分子的电子光谱中奇特的**强度交变效应**（W. Heisenberg, F. Hund, 1927）．由核自旋固有的对称性条件可知，在电子的 $\Sigma$ 项中，$K$ 值为偶数和奇数的转动分量相对于核的对称性相反，因而核的统计权重 $g_s$ 和 $g_a$ 不同（参看第三卷§86）．按照定则(53.14)，两个不同的 $\Sigma$ 项之间的跃迁，只有 $J'=J\pm1$ 是允许的，并且由于(53.4)一个 $\Sigma$ 项应该是偶的，而另一个是奇的．结果，对给定的 $J'-J$ 值，在两个对称能级和两个反对称能级之间交替地发生 $J$ 相继取值的跃迁

① 与跃迁 $J'=J+1, J, J-1$ 所对应的一族曲线分别叫 $P$、$Q$ 和 $R$ 分支．

(图 3 给出了 $\Sigma_g^+$态和 $\Sigma_u^+$ 态的例子). 另一方面,所观察到的谱线强度正比于该初态中的分子数,因而正比于它的统计权重. 这样,相继谱线($J=0,1,2,\cdots$)的强度将交替地大一些和小一些, 交替地正比于 $g_s$ 和 $g_a$[由公式 (53.12)所给的单调变化除外]①.

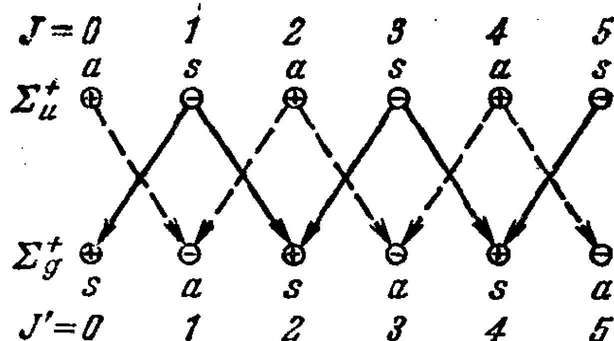



图 3

当两个不同的电子项之间发生跃迁时, 振动量子数的改变没有任何严格的选择定则. 但有一个定则 (**弗兰克-康登原理**)可以用来预言振动态最可能的改变. 它的根据是: 因为原子核的质量比较大, 其运动是准经典的 (比较第三卷 § 90 中对预离解所做的讨论)②.

对电子项 $U(r)$ 和$U'(r)$的振动态$E$和$E'$之间的跃迁,点 $r=r_0$ 的邻域在决定跃迁矩阵元的积分中最为重要. 在这个领域中,

$$U(r_0)-U'(r_0)=E-E' \tag{53.16}$$

(即原子核在两个状态中相对运动的动量相等:$p=p'$). 对于给定的一个$E$值,差$E-U$ 和 $E'-U'$ 越小,跃迁几率(作为终态能量$E'$的函数)就越大,在

$$E-U(r_0)=E'-U'(r_0)=0 \tag{53.17}$$

① 这里假定总核自旋值不同的所有状态是均匀占据的.

② 严格来说,还需要振动量子数足够大.

射，即当"转变点"$r_0$［方程(53.16)的根］与核的经典转折点重合时，跃迁几率最大（图4中画出了$E$和最可能的$E'$之间的关系）. 更直观地说，在核的转折点附近，跃迁是最可几的，核在那里的时间相对来说比较长.

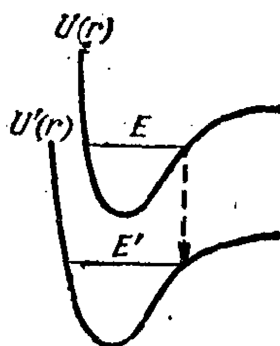



图 4

## § 54. 双原子分子的辐射：振动光谱和转动光谱

对于分子的电子态不改变的跃迁，上一节所给出的选择定则和跃迁几率公式仍然成立①. 这里我们仅仅讨论这些跃迁的若干特点.

首先，在由同类原子组成的分子中，选择定则(53.4)禁止电子态不变的偶极跃迁，因为在这种跃迁中，电子项的宇称保持不变. 由§53中的讨论可知，只有当考虑核自旋与电子的相互作用时，或者分子是由同一元素的不同同位素组成时，由于转动对电子态的影响，这样的跃迁才是允许的.

偶极矩矩阵元的计算可以化成随分子一起转动的坐标系中的计算(按照第三卷§87的公式). 在这个坐标系中，分子的波函数为两部分之积：一部分是核间距离$r$给定时电子的波函数，另一部分是在电子和核的有效场$U(r)$中核的振动波函数. 当完全忽略原子核运动对电子态的影响时，所研究的跃迁中，初态和终态的电子波函数是相同的. 因而，对电子坐标的积分在矩阵元中只给出分子的平均偶极矩$\bar{d}$(显然，沿着它的轴线指向)，它是距离$r$的函数.

① 振动态(以及转动态）改变的跃迁构成所谓分子的振动光谱，它处于近红外区(波长<20μm). 而仅有转动态改变的跃迁形成转动光谱，它处于远红外区(波长>20μm).

由于振动很小，函数 $\bar{d}(r)$ 可以展开成振动坐标$q=r-r_0$的幂级数。当跃迁包括振动态的变化时，由于同一个场 $U(q)$ 中的振动波函数正交，矩阵元中不会出现级数的零次项，因而只剩下与 $q$ 成正比的项．如果把振动看成谐振动，那么按照线性振子的已知性质（第三卷 § 23），只有相邻振动态之间的跃迁矩阵元才不为零．所以，对于振动量子数 $v$，将有选择定则

$$v'-v=\pm 1. \tag{54.1}$$

但是，当考虑振动的非谐振性和函数 $\bar{d}(q)$ 的高次项时，这个定则将不再成立．

对于纯粹的转动跃迁（振动态也不发生改变），可以认为，偶极矩沿动坐标轴 $\zeta$ 的分量的矩阵元，就等于分子的平均偶极矩 $\bar{d}=\bar{d}(0)$①．结果，对 $J\longrightarrow J-1$ 跃迁的几率，我们得到公式

$$w(nJ\to n, J-1)=\frac{4w^3}{3\hbar c^3}\bar{d}^2\frac{J^2-\Omega^2}{J(2J+1)}, \tag{54.2}$$

这个公式不仅可以用来计算相对几率［如(53.12)］，而且可以用来计算绝对几率．［公式(54.2) 是对情形 $a$ 写出的；在情形 $b$ 中，$J$，$\Omega$必须由 $K$，$\Lambda$ 代替］

纯转动跃迁的频率由转动能量 $BJ(J+1)$的差给出，即

$$\hbar\omega_{J,J-1}=2BJ. \tag{54.3}$$

相邻两条谱线的间隔均为 $2B$.

## § 55. 核辐射

对于核的$\gamma$辐射，通常要求系统的线度（核的半径$R$）比光子波长小．但是核的能级间的距离（因而也是$\gamma$量子的能量）通常要比核中每个核子的能量小．所以，量 $R/\lambda$ 与核子在核中的速度 $v/c$ 没有直接联系，一般说来，它显著地小于 $v/c$．因此，$M1$辐射的几

① 在同原子分子中，$\bar{d}=0$．根据对称性，这是显而易见的．

率通常比 $E, l+1$ 辐射的几率大(比较 § 50 开头).

对于核辐射，总角动量("自旋")和宇称所遵从的一般选择定则，和任何系统的辐射是一样的.核辐射的特点在于高多极跃迁的普遍性. 原子辐射一般是电偶极型；和原子辐射不同，在核辐射中，由于选择定则的存在，低能量的电偶极跃迁比较少.

如果把核的辐射跃迁看成单粒子跃迁——核中一个核子的状态改变时，其余部分的状态不变，则对这个核子的角动量有附加的选择定则. 不过，这样的"单粒子"选择定则事实上并不是严格的.

关于同位旋的选择定则是核所特有的. 同位旋分量 $T_3$ 由原子量和核电荷数决定:

$$T_3=\frac{1}{2}(Z-N)=Z-\frac{A}{2}.$$

当 $T_3$ 值给定后，同位旋的绝对量可以取 $T\geqslant|T_3|$ 的任何值. 在辐射跃迁中将出现关于量子数 $T$ 的选择定则，这是因为，核的电矩和磁矩算符当用核子的同位旋算符表示时，是一个标量与一个矢量在同位旋空间中的 $x_3$ 分量之和(参看第三卷 § 116)，因而它们的矩阵元只在

$$T'-T=0, \pm 1 \tag{55.1}$$

时才不为零. 但是这个定则本身并没有对轻核中的跃迁施加任何特别的限制（只有对于轻核才能以合理的精确度讲同位旋守恒)；问题在于这些核的低能级中实际上就没有 $T>1$ 的能级.

但是，对于 $E1$-跃迁，还有进一步的选择定则. 这是因为电偶极矩中没有同位旋标量部分，它的算符仅仅是同位旋矢量的 $x_3$ 分量(参看第三卷 § 116). 所以，如果 $T_3=0$, 则 $\Delta T=0$ 的跃迁也是禁止的.换句话说，在中子数和质子数相等的核中($N=Z, A=2Z$)，只有当

$$T'-T=\pm 1(T_3=0) \tag{55.2}$$

时，$E1$-跃迁才是可能的．当然，遵守这个定则的准确度取决于核同位旋守恒的精确度．

核中 $E1$-跃迁的几率大小，还要受到一个特定核子运动时核的其余部分反冲效应的影响．从对偶极矩的贡献来看，这种反冲效应使质子的有效电荷为$e(1-Z/A)$而不是 $e$，中子的有效电荷为$-eZ/A$而不是 0(参看第三卷 § 118)．质子有效电荷的减小将使 $E1$-跃迁的几率有所下降．

非球形核的能级具有转动结构，因而这种核的 $\gamma$ 辐射谱显示出一种特有的转动结构．

核子在“固定的”非球形(轴向)核中运动时场的对称性，与电子在“固定的”同核双原子分子中运动时场的对称性一样（点群 $C_{\infty h}$）．因而，非球形核能级的对称性（以及与之相关的矩阵元的选择定则)和双原子分子能级的对称性相似(参看第三卷§119)．特别是，和同核双原子分子一样，同一转动谱带内的电偶极跃迁(即核的内禀状态不改变的跃迁)是禁止的(比较 § 54)．所以，这样的跃迁是作为 $E2$-或 $M1$-跃迁出现的．在第一种情形下，原子核的总角动量 $J$ 可以改变 2 或 1，而在第二种情形下改变 1．

按照式(46.9)，四极跃迁几率对终态核总角动量的分量值 $M$ 求和为

$$W_{E2}=\frac{\omega^5}{15\hbar c^5}\sum_{M'}|\langle J'\Omega M'|Q_{2,-m}^{(\text{电})}|J\Omega M\rangle|^2$$

（$J$ 为核的总角动量，$\Omega$ 为总角动量在核轴线上的分量，$m=M-M'$）．利用第三卷(110.8)，这个和可以表示成已知量的平方，这个已知量为对核的内禀态对角化的跃迁四极矩 $\overline{Q}_{2\lambda}$，$\overline{Q}_{2\lambda}$ 是对固定在核上的坐标轴 $\xi\eta\zeta$ 定义的．在这里，$\lambda=\Omega-\Omega'$，所以，在所考虑的情形下($\Omega'=\Omega$)只出现分量 $\overline{Q}_{20}$．按照定义，量

$$eQ_0=e\int\rho_{ii}(2\zeta^2-\xi^2-\eta^2)\,\mathrm{d}\xi\mathrm{d}\eta\mathrm{d}\zeta=-2e(\overline{Q}_{20})_{ii}$$

叫做核的四极矩．所以

$$w_{E2}(\Omega J\to\Omega J')=\frac{\omega^5}{60\hbar c^5}Q_0^2(2J'+1)\begin{pmatrix}J' & 2 & J\\ -\Omega & 0 & \Omega\end{pmatrix}^2. \tag{55.3}$$

显然，我们有

$$w_{E2}(\Omega J\to\Omega,J-1)=\frac{\omega^5}{20\hbar c^5}Q_0^2\,\frac{\Omega^2(J^2-\Omega^2)}{(J-1)J(J+1)(2J+1)},$$

$$w_{E2}(\Omega J\to\Omega,J-2)=\frac{\omega^5}{40\hbar c^5}Q_0^2\,\frac{(J^2-\Omega^2)[(J-1)^2-\Omega^2]}{(J-1)J(2J-1)(2J+1)}.$$

不过，对这些公式需要作如下说明．这些公式中的矩阵元是用形如

$$\psi_{J\Omega M}=\text{const}\cdot x_\Omega D_{\Omega M}^{(J)}(\boldsymbol{n})$$

的波函数计算出来的（$x_\Omega$ 为核的内禀态的波函数）．这些函数与角动量在 $\zeta$ 轴上的分量的确定值(大小和方向都确定)相对应．但是，在核中，只有状态的宇称和角动量的分量值是确定的(后者通常取为 $\Omega$)．所以当 $\Omega\neq0$ 时，初态和终态的波函数应该是如下形式的组合：

$$\frac{1}{\sqrt2}(\psi_{J\Omega M}\pm\psi_{J,-\Omega,M}),\qquad \frac{1}{\sqrt2}(\psi_{J'\Omega M'}\pm\psi_{J',-\Omega,M'}).$$

第一项的乘积和第二项的乘积与前面对四极矩矩阵元所得值相同；如果 $2\Omega\leqslant2$，“交叉”积将给出非零的积分①．因而，当 $\Omega=1/2$ 或 1 时，公式(55.3)并不是精确成立的．在这种情形下，跃迁几率中将出现不能用四极矩平均值表示的附加项②．

由类似于公式(55.3)的推导，我们得到 $M1$ 跃迁几率为

---

① 对于 $2^l$ 极矩的矩阵元，被积函数中将包含乘积

$$D_{-\Omega M}^{(J')*}D_{q'q}^{(l)}D_{\Omega M}^{(J)}.$$

当 $q'=-2\Omega$ 时，角度积分将不为零，而且 $q'$ 只能取 $-l$ 到 $+l$ 的值．所以必定有 $2\Omega\leqslant l$．

② 事实上，只在 $\Omega=1/2$ 时，核的转动和内禀态之间的耦合特别大，这一项才给出较为重要的修正(参看第三卷 § 119)．

$$w_{M1}(\Omega J\to\Omega, J-1)=$$

$$=\frac{4\omega^3}{3\hbar c^3}\mu^2(2J-1)\begin{pmatrix} J-1 & 1 & J \\ -\Omega & 0 & \Omega\end{pmatrix}^2=\frac{4\omega^3}{3\hbar c^3}\mu^2\frac{J^2-\Omega^2}{J(2J+1)}, \tag{55. 4}$$

式中 $\mu$ 为核磁矩(当 $\Omega=1/2$ 时，这个公式不适用).

## § 56. 光电效应：非相对论情形

在 § 49—§ 52 中我们研究了分立谱原子能级间的辐射跃迁(发射或吸收光子). 光电效应与这种光子吸收过程的区别仅仅在于终态属于连续谱.

光电效应的截面可以用解析方法对氢原子和类氢离子 (核电荷数 $Z\ll 137$)作精确的计算.

设初态中的电子在分立能级 $\varepsilon_i\equiv -I$( $I$ 为原子的电离势)上，光子具有确定的动量 $\boldsymbol{k}$;在终态，电子具有动量 $p$(和能量$\varepsilon_f\equiv\varepsilon$). 由于 $\boldsymbol{p}$ 取一系列连续值,所以光电效应的截面公式为

$$\mathrm{d}\sigma=2\pi|V_{fi}|^2\delta(-I+\omega-\varepsilon)\frac{\mathrm{d}^3p}{(2\pi)^3} \tag{56. 1}$$

[比较式(44. 3)]. 这里电子终态波函数归一化为在单位体积中有一个粒子. 光子波函数仍然按和以前一样的方式归一化. 为了得到截面 $\mathrm{d}\sigma$, 几率 $\mathrm{d}w$ 应该除以光子的通量密度(等于 $c/V=c$)，但是当用相对论单位时,将不影响公式(56. 1)的形式.

和式(45. 2)中一样,我们取光子的三维横向规范. 这时

$$V_{fi}=-e\boldsymbol{A}\cdot\boldsymbol{j}_{fi}=-e\sqrt{4\pi}\frac{1}{\sqrt{2\omega}}M_{fi},$$

式中

$$M_{fi}=\int\psi'^*(\boldsymbol{\alpha}\cdot\boldsymbol{e})\mathrm{e}^{\mathrm{i}\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}}\psi\mathrm{d}^3x \tag{56. 2}$$

($\psi\equiv\psi_i$ 和 $\psi'\equiv\psi_f$ 是电子的初态和终态波函数). 在式(56. 1)中令

$d^3p\to p^2d|p|do=\varepsilon|p|d\varepsilon do$，并作积分消去 $\varepsilon$ 的 $\delta$ 函数，这个公式可以改写成

$$d\sigma=e^2\frac{\varepsilon|p|}{2\pi\omega}|M_{fi}|^2do. \tag{56.3}$$

我们将对以下两种情形进行计算，这两种情形的区别在于光子的能量大小不同，即 $\omega\gg I$ 和 $\omega\ll m$. 由于 $I\sim me^4Z^2\ll m$，所以，这两个区域部分重叠(当 $I\ll\omega\ll m$ 时)，因而，研究了这两种情形，实质上就给出了光电效应的完全描述.

首先我们来研究

$$\omega\ll m \tag{56.4}$$

的情形. 这时无论在初态还是在终态，电子速度都很小，因而对于电子来说，完全属于非相对论性问题. 所以，我们可以用速度的非相对论算符 $\hat{v}=-i\nabla/m$ 代替式(56.2) 中的 $\alpha$(比较 § 45). 此外，可以取偶极近似，令 $e^{ik\cdot r}\approx1$，即与电子动量相比时忽略光子动量. 这时，

$$d\sigma=e^2\frac{m|p|}{2\pi\omega}|e\cdot v_{fi}|^2do,\quad v_{fi}=-\frac{i}{m}\int\psi'^*\nabla\psi\cdot d^3x. \tag{56.5}$$

我们将从氢原子(或类氢离子)的基态能级研究光电效应. 这时

$$\psi=\frac{(Ze^2m)^{3/2}}{\sqrt{\pi}}e^{-Ze2mr} \tag{56.6}$$

(在通常的单位中，$me^2\to1/a_0$，这里 $a_0=\hbar^2/me^2$ 为玻尔半径).

波函数 $\psi'$ 应该这样取，它的渐近形式必须包含一个平面波 $e^{ip\cdot r}$ 和一个入射的球面波(参看第三卷 § 136，在那里，这个函数表示为 $\psi_p^{(-)}$). 由于 $l$ 的选择定则，来自 $s$ 态的跃迁只可能以 $p$ 态为终态(偶极情形). 所以，在展开式①

① 在这一节的余下部分，$p$ 代表 $|p|$.

$$\psi_{\boldsymbol{p}}^{(-)}=\frac{1}{2p}\sum_{l=0}^{\infty}i^l(2l+1)\mathrm{e}^{-i\delta_l}R_{pl}(r)P_l(\boldsymbol{n}\cdot\boldsymbol{n}_1) \tag{56.7}$$

中($\boldsymbol{n}=\boldsymbol{p}/p$, $\boldsymbol{n}_1=\boldsymbol{r}/r$) 只保留 $l=1$ 的项就够了. 略去无关紧要的相因子，我们有

$$\psi'=\frac{3}{2p}(\boldsymbol{n}\cdot\boldsymbol{n}_1)R_{p1}(r). \tag{56.8}$$

由式(56.6)和(56.8)给出的函数 $\psi$ 和 $\psi'$，我们有

$$\boldsymbol{e}\cdot\boldsymbol{v}_{fi}=\frac{3(Ze^2m)^{5/2}}{2\sqrt{\pi}\,mp}\iint(\boldsymbol{n}\cdot\boldsymbol{n}_1)(\boldsymbol{n}_1\cdot\boldsymbol{e})\mathrm{e}^{-Ze^2mr}R_{p1}(r)\mathrm{d}o_1\cdot r^2\mathrm{d}r=$$

$$=\frac{\sqrt{2\pi}\,(Ze^2m)^{5/2}}{pm}(\boldsymbol{n}\cdot\boldsymbol{e})\int_0^{\infty}r^2\mathrm{e}^{-Ze^2mr}R_{p1}(r)\mathrm{d}r.$$

按照第三卷(36.18)和(36.24)，径向函数（在这里所采用的单位中）为

$$R_{p1}=\frac{\sqrt{8\pi}\,Ze^2m}{3}\sqrt{\frac{1+\nu^2}{\nu(1-\mathrm{e}^{-2\pi\nu})}}pr\mathrm{e}^{-ipr}F(2+i\nu,4,2ipr),$$

式中

$$\nu=\frac{Ze^2m}{p}\left(=\frac{Ze^2}{\hbar v}\right). \tag{56.9}$$

我们所需要的积分可以利用下式计算:

$$\int_0^{\infty}\mathrm{e}^{-\lambda z}z^{\gamma-1}F(\alpha;\gamma,kz)\mathrm{d}z=\Gamma(\gamma)\lambda^{\alpha-\gamma}(\lambda-k)^{-\alpha}$$

[参看第三卷($f$,3)]. 再注意到

$$\left(\frac{\nu+i}{\nu-i}\right)^{i\nu}=\mathrm{e}^{-2\nu\,\mathrm{arcctg}\,\nu},$$

我们得到

$$\boldsymbol{e}\cdot\boldsymbol{v}_{fi}=\frac{2^{7/2}\pi\nu^3(\boldsymbol{n}\cdot\boldsymbol{e})}{\sqrt{p}\,m(1+\nu^2)^{3/2}}\cdot\frac{\mathrm{e}^{-2\nu\,\mathrm{arcctg}\,\nu}}{\sqrt{1-\mathrm{e}^{-2\pi\nu}}}.$$

氢原子(或类氢离子) 基态能级的电离能为 $I=Z^2e^4m/2$. 因此

$$\omega=\frac{p^2}{2m}+I=\frac{p^2}{2m}(1+\nu^2). \qquad (56.10)$$

应用这个关系式，我们得到在立体角元 d$o$ 内发射一个电子的光电效应截面的最后表达式

$$\mathrm{d}\sigma=2^7\pi\alpha a^2\left(\frac{I}{\hbar\omega}\right)^2\frac{\mathrm{e}^{-4\nu\,\mathrm{arcctg}\,\nu}}{1-\mathrm{e}^{-2\pi\nu}}(\boldsymbol{n}\cdot\boldsymbol{e})^2\mathrm{d}o, \qquad (56.11)$$

式中 $a=\hbar^2/mZe^2=a_0/Z$（今后都用通常单位）．我们看到，光电子的角分布由因子$(\boldsymbol{n}\cdot\boldsymbol{e})^2$决定．这个因子在与入射光子的极化方向相平行的方向最大，而在和 $\boldsymbol{e}$ 垂直的方向上（包括入射方向）为零．对于非极化光子，公式（56.11）应该对方向 $\boldsymbol{e}$ 求平均，这等价于代换

$$(\boldsymbol{n}\cdot\boldsymbol{e})^2\longrightarrow\frac{1}{2}(\boldsymbol{n}_0\times\boldsymbol{n})^2,$$

式中 $\boldsymbol{n}_0=\boldsymbol{k}/k$[参看式(45.4b)]．

公式(56.11)对所有角度积分，便得光电效应的总截面

$$\sigma=\frac{2^9\pi^2}{3}\alpha a^2\left(\frac{I}{\hbar\omega}\right)^4\frac{\mathrm{e}^{-4\nu\,\mathrm{arcctg}\,\nu}}{1-\mathrm{e}^{-2\pi\nu}} \qquad (56.12)$$

(M. Stobbe, 1930)．

当 $\hbar\omega\to I$（即 $\nu\to\infty$）时，$\sigma$的极限值为

$$\sigma=\frac{2^9\pi^2}{3\mathrm{e}^4}\alpha a^2=\frac{2^9\pi^2}{3\mathrm{e}^4}\frac{\alpha a_0^2}{Z^2}=0.23\frac{a_0^2}{Z^2} \qquad (56.13)$$

（分母中的 e 是 2.71…！）．如一个形成带电粒子的反应中应有的那样（参看第三卷 § 147），光电效应在其阈值附近趋于一个恒定的极限．

$\hbar\omega\gg I$（且依然有 $\hbar\omega\ll mc^2$）的情形对应于玻恩近似（$\nu=Ze^2/\hbar v\ll1$）．公式(56.12)变为

$$\sigma=\frac{2^8\pi}{3}\alpha a_0^2Z^5\left(\frac{I_0}{\hbar\omega}\right)^{7/2} \qquad (56.14)$$

（$I_0=e^4m/2\hbar^2$ 为氢原子的电离能）．

与光电效应相反的过程是电子与静止离子的辐射复合. 这个过程的截面($\sigma_{复合}$)可以利用细致平衡原理(第三卷 §144)由光电效应截面($\sigma_{光电}$)求出. 按照细致平衡原理, 过程 $i\to f$ 和过程 $f\to i$ (在 $i$ 和 $f$ 状态都有两个粒子)的截面以关系式

$$g_i p_i^2 \sigma_{i\to f} = g_f p_f^2 \sigma_{f\to i}$$

相联系. 式中的 $p_i$ 和 $p_f$ 为粒子相对运动的动量, $g_i$ 和 $g_f$ 为 $i$ 和 $f$ 状态的自旋统计权重. 考虑到光子的 $g=2$ (有两个极化方向), 而自由电子和离子的统计权重等于氢原子基态的统计权重, 对于这个状态, 我们得到

$$\sigma_{复合} = \sigma_{光电}\frac{2\boldsymbol{k}^2}{\boldsymbol{p}^2} \tag{56.15}$$

($\boldsymbol{p}=m\boldsymbol{v}$ 为入射电子的动量, $\boldsymbol{k}$ 为所发射的光子的动量).

## 习　　题

1. 试直接利用非相对论情形中的玻恩近似导出公式(56.14).

**解**　在玻恩近似中, 公式(56.5)中的 $\psi'$ 就是平面波 $\psi'=e^{i\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{r}}$, 而 $\psi$ 仍为函数(56.6). 这时

$$\boldsymbol{v}_{fi}=\boldsymbol{v}_{if}=\frac{1}{m}\int \psi\hat{\boldsymbol{p}}\psi' d^3x = \frac{\boldsymbol{p}}{m}\frac{(Ze^2m)^{3/2}}{\sqrt{\pi}}(e^{-Ze^2mr})_{\boldsymbol{p}}.$$

傅里叶分量由公式(57.6b)给出, 因而

$$\boldsymbol{v}_{fi}=8\sqrt{\pi}\,p^{-3}m^{3/2}(Ze^2)^{5/2}\boldsymbol{n}.$$

代入式(56.5)并对 $do$ 积分, 便得到(56.14)(这时, $p^2/2m\approx\omega$ 非常准确地成立).

2. 试决定一快速但仍为非相对论性的电子($I\ll mv^2\ll mc^2$)与 $Z\ll 137$ 的原子核的辐射复合的总截面.

**解**　将(56.14)代入(56.15)就可以得出俘获到 $K$ 壳层(主量子数 $n=1$)上的截面:

$$\sigma_1^{复合} = \frac{2^7\pi}{3}Z^5\alpha^3 a_0^2\left(\frac{I_0}{\varepsilon}\right)^{5/2}$$

($\varepsilon=mv^2/2$ 为入射电子的能量; $\hbar\omega\approx\varepsilon$). 形成原子的其它状态中只有 $s$ 态

比较重要：当计算玻恩近似中的矩阵元时，小 $r$ 的束缚态波函数的值比较重要（在 § 57 中将要看到），这个函数值在 $l>0$ 时比 $l=0$ 时小．将 $\psi$ 按 $r$ 的幂展开，只取前两项就够了）．对于 $l=0$ 且 $n$ 为任意值的状态，这两项为

$$\psi=\frac{1}{\sqrt{\pi}a^{3/2}n^{3/2}}\left(1-\frac{r}{a}\right),$$

即 $n$ 仅仅以公因子 $n^{-3/2}$ 的形式出现[此式是通过展开第三卷的函数(36,13)得到的]．所以，总复合截面为

$$\sigma_{复合}=\sum_{n=1}^{\infty}\sigma_n^{复合}=\sigma_1^{复合}\sum_{n=1}^{\infty}\frac{1}{n^3}=\zeta(3)\sigma_1^{复合}$$

[$\zeta$ 函数值为：$\zeta(3)=1,202$]．

## § 57. 光电效应：相对论情形

现在我们来研究

$$\omega\gg I \tag{57.1}$$

的情形．这时我们也有 $\varepsilon=\omega-I\gg I$，因此，原子核的库仑场对光电子波函数($\psi'$) 的影响可以用微扰论计算．我们把 $\psi'$ 写成如下形式：

$$\psi'=\frac{1}{\sqrt{2\varepsilon}}(u'e^{i\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{r}}+\psi^{(1)}). \tag{57.2}$$

光电子可以是相对论性的，因而把式(57.2)中的非微扰函数写成相对论性的平面波形式(23.1)．

虽然在初态中电子是非相对论性的，但是由于下面要解释的原因，它的波函数 $\psi$ 必须包括相对论修正($\sim Ze^2$)．这样的函数由下式给出（参看 § 39的习题）：

$$\psi=\left(1-\frac{i}{2m}\gamma^0\boldsymbol{\gamma}\cdot\boldsymbol{\nabla}\right)\frac{u}{\sqrt{2m}}\psi_{非相}. \tag{57.3}$$

式中的 $\psi_{非相}$ 为非相对论性束缚态函数(56.6)，$u$ 为静止电子的双旋量振幅，归一化条件 $\bar{u}u=2m$．

把函数(57.2)和(57.3)代入矩阵元(56.2)中①:

$$M_{fi}=\frac{1}{2\sqrt{m\varepsilon}}\int\left\{\bar{u}'(\boldsymbol{\gamma}\cdot\boldsymbol{e})\left[\left(1-\frac{\mathrm{i}}{2m}\gamma^0\boldsymbol{\gamma}\cdot\nabla\right)u\psi_{非相}\right]\mathrm{e}^{-\mathrm{i}(\boldsymbol{p}-\boldsymbol{k})\cdot\boldsymbol{r}}+\right.$$
$$\left.+\bar{\psi}^{(1)}(\boldsymbol{\gamma}\cdot\boldsymbol{e})\mathrm{e}^{\mathrm{i}\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}}u\psi_{非相}\right\}\mathrm{d}^3x. \tag{57.4}$$

为了得到这个量按 $Ze^2$ 的幂展开的第一项，可用常数 $(Ze^2m)^{3/2}/\sqrt{\pi}$ 代换大括号中第二项的 $\psi_{非相}$. 由于这个代换，当 $\boldsymbol{p}-\boldsymbol{k}\neq 0$ 时，第一项为零(正是由于这个原因，在 $\psi$ 中还必须考虑正比于 $Ze^2$ 的第一级相对论修正. 当 $v\sim 1$ 时，这个修正对截面的贡献和 $\psi_{非相}$按 $Ze^2$ 展开的第二项的贡献具有相同的数量级).

在式(57.4)的第一项中进行分部积分，使算符$\nabla$由作用在 $\psi_{非相}$ 上转移到指数因子上. 结果我们得到

$$M_{fi}=\frac{(Ze^2m)^{3/2}}{2(\pi m\varepsilon)^{1/2}}\left\{\bar{u}'(\boldsymbol{\gamma}\cdot\boldsymbol{e})\left[1+\frac{1}{2m}\gamma^0\boldsymbol{\gamma}\cdot(\boldsymbol{p}-\boldsymbol{k})\right]u(\mathrm{e}^{-Ze^2mr})_{\boldsymbol{p}-\boldsymbol{k}}\right.$$
$$\left.+\bar{\psi}^{(1)}_{-\boldsymbol{k}}(\boldsymbol{\gamma}\cdot\boldsymbol{e})u\right\}, \tag{57.5}$$

式中的矢量下标代表空间傅里叶分量. 精确到 $Ze^2$ 项，我们有②:

$$(\mathrm{e}^{-Ze^2mr})_{\boldsymbol{p}-\boldsymbol{k}}=\frac{8\pi Ze^2m}{(\boldsymbol{p}-\boldsymbol{k})^4}. \tag{57.6}$$

---

① 函数(57,3)是对距离 $r\sim 1/mZe^2$导出的，在这个距离上，修正项的相对数量级为$Ze^2$. 但是对于基态(以及所有的$s$态)，由于纯指数函数(56.6)的导数［因而(57.3)中的修正项］总与$Ze^2$ 成正比，公式(57.3)对任何 $r$ 都适用. 这就使我们能够把(57.3)应用于现在所研究的问题(这时，很小的 $r$ 都不能忽视；当 $v\sim 1$ 时，$r\sim 1/m$ 就不能忽略).

② 取等式

$$(\Delta-\lambda^2)\frac{\mathrm{e}^{-\lambda r}}{r}=-4\pi\delta(\boldsymbol{r})$$

两边的傅里叶分量，我们得到

$$\left(\frac{\mathrm{e}^{-\lambda r}}{r}\right)_{\boldsymbol{q}}=\frac{4\pi}{q^2+\lambda^2}. \tag{57.6a}$$

此式对参数 $\lambda$ 微分给出

$$(\mathrm{e}^{-\lambda r})_{\boldsymbol{q}}=\frac{8\pi\lambda}{(q^2+\lambda^2)^2}. \tag{57.6b}$$

为了计算傅里叶分量 $\psi^{(1)}_{k}$，我们写出函数 $\psi^{(1)}$ 所满足的方程式：

$$(\gamma^0\varepsilon+\mathrm{i}\boldsymbol{\gamma}\cdot\nabla-m)\psi^{(1)}=e(\gamma^\mu A_\mu)u'\mathrm{e}^{\mathrm{i}pr}=-\frac{Ze^2}{r}\gamma^0u'\mathrm{e}^{\mathrm{i}\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{r}}$$

［它是将(57.2)代入(32.1)得到的］. 对这个方程式两边应用算符 $(\gamma^0\varepsilon+\mathrm{i}\boldsymbol{\gamma}\cdot\nabla+m)$，我们得到

$$(\Delta+\boldsymbol{p}^2)\psi^{(1)}=-Ze^2(\gamma^0\varepsilon+\mathrm{i}\boldsymbol{\gamma}\cdot\nabla+m)(\gamma^0u')\frac{1}{r}\mathrm{e}^{\mathrm{i}\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{r}}.$$

给这个方程乘以 $\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}}$ 并对 $\mathrm{d}^3x$ 积分，同时在含 $\Delta$ 和 $\nabla$ 的项中用普通方法进行分部积分，可以得到

$$(\boldsymbol{p}^2-\boldsymbol{k}^2)\psi^{(1)}_{\boldsymbol{k}}=-Ze^2(\gamma^0\varepsilon-\boldsymbol{\gamma}\cdot\boldsymbol{k}+m)(\gamma^0u')\left(\frac{1}{r}\right)_{\boldsymbol{k}-\boldsymbol{p}}$$

$$=-Ze^2(2\varepsilon\gamma^0-\boldsymbol{\gamma}\cdot(\boldsymbol{k}-\boldsymbol{p}))(\gamma^0u')\frac{4\pi}{(\boldsymbol{k}-\boldsymbol{p})^2}.$$

在最后一行中，考虑到振幅 $u'$ 满足方程

$$(\varepsilon\gamma^0-\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{\gamma}-m)u'=0 \quad 或 \quad (\varepsilon\gamma^0+\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{\gamma}-m)\gamma^0u'=0,$$

由此我们求出

$$\bar{\psi}^{(1)}_{-\boldsymbol{k}}=\psi^{(1)*}_{\boldsymbol{k}}\gamma^0=4\pi Ze^2\bar{u}'\frac{2\varepsilon\gamma^0+\boldsymbol{\gamma}\cdot(\boldsymbol{k}-\boldsymbol{p})}{(\boldsymbol{k}^2-\boldsymbol{p}^2)(\boldsymbol{k}-\boldsymbol{p})^2}\gamma^0. \qquad (57.7)$$

将(57.6)和(57.7)代入矩阵元(57.5)，可以把它写成

$$M_{fi}=\frac{4\pi^{1/2}(Ze^2m)^{5/2}}{(\varepsilon m)^{1/2}(\boldsymbol{k}-\boldsymbol{p})^2}\bar{u}'Au,$$

式中

$$A=a(\boldsymbol{\gamma}\cdot\boldsymbol{e})+(\boldsymbol{\gamma}\cdot\boldsymbol{e})r^0(\boldsymbol{\gamma}\cdot\boldsymbol{b})+(\boldsymbol{\gamma}\cdot\boldsymbol{c})\gamma^0(\boldsymbol{\gamma}\cdot\boldsymbol{e}),$$

$$a=\frac{1}{(\boldsymbol{k}-\boldsymbol{p})^2}+\frac{\varepsilon}{m}\frac{1}{\boldsymbol{k}^2-\boldsymbol{p}^2},\quad \boldsymbol{b}=-\frac{\boldsymbol{k}-\boldsymbol{p}}{2m(\boldsymbol{k}-\boldsymbol{p})^2},$$

$$\boldsymbol{c}=\frac{\boldsymbol{k}-\boldsymbol{p}}{2m(\boldsymbol{k}^2-\boldsymbol{p}^2)}.$$

截面为

$$d\sigma=\frac{8e^2(Ze^2m)^5|\boldsymbol{p}|}{\omega(\boldsymbol{k}-\boldsymbol{p})^4m}(\bar{u}'Au)(\bar{u}\bar{A}u')do.$$

这里 $\bar{A}=\gamma^0A^+\gamma^0$(参看 § 65). 此式还必须对电子自旋的终态方向求和并对初始方向求平均；求和与求平均时，应用下面 § 65 中的规则和初、终态的极化密度矩阵

$$\rho=\frac{m}{2}(\gamma^0+1),\qquad \rho'=\frac{1}{2}(\gamma^0\varepsilon-\boldsymbol{\gamma}\cdot\boldsymbol{p}+m)$$

(在初态中 $\boldsymbol{p}=0,\varepsilon=m$). 结果得到表达式

$$d\sigma=\frac{16e^2(Ze^2m)^5|\boldsymbol{p}|}{m\omega(\boldsymbol{k}-\boldsymbol{p})^4}\mathrm{Sp}(\rho'A\rho\bar{A})do.$$

迹的计算(利用公式(22.22))是纯代数运算，其结果为

$$\mathrm{Sp}(\rho'A\rho\bar{A})=\frac{m}{\varepsilon+m}[a\boldsymbol{p}-(\boldsymbol{b}-\boldsymbol{c})(\varepsilon+m)]^2$$
$$+4m(\boldsymbol{b}\cdot\boldsymbol{e})[(\varepsilon+m)(\boldsymbol{c}\cdot\boldsymbol{e})+a(\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{e})]$$

(假定矢量 $\boldsymbol{e}$ 为实数，即光子被认为是线性极化的).

为了得到光电效应截面公式的最终形式，我们引入极角 $\theta$ 和 $\boldsymbol{p}$ 的方位角 $\varphi$，这时方向 $\boldsymbol{k}$ 就是 $z$ 轴，平面 $\boldsymbol{k},\boldsymbol{e}$ 就是平面 $xz$(因而 $\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{e}=|\boldsymbol{p}|\cos\varphi\sin\theta$). 当 $\omega\gg I$ 时，能量守恒可以写成 $\varepsilon-m=\omega$ 的形式(而不是 $\varepsilon-m=\omega-I$). 容易证明，这时

$$\boldsymbol{k}^2-\boldsymbol{p}^2=-2m(\varepsilon-m),\qquad (\boldsymbol{k}-\boldsymbol{p})^2=2\varepsilon(\varepsilon-m)(1-v\cos\theta).$$

式中 $\boldsymbol{v}=\boldsymbol{p}/\varepsilon$ 为光电子的速度. 经过简单的计算，最后得到

$$d\sigma=Z^5\alpha^4r_e^2\frac{v^3(1-v^2)^3\sin^2\theta}{(1-\sqrt{1-v^2})^5(1-v\cos\theta)^4}$$
$$\times\left\{\frac{(1-\sqrt{1-v^2})^2}{2(1-v^2)^{3/2}}(1-v\cos\theta)+\right.$$
$$\left.\left[2-\frac{1-\sqrt{1-v^2}(1-v\cos\theta)}{1-v^2}\right]\cos^2\varphi\right\}do,\qquad(57.8)$$

式中的 $r_e=e^2/m$.

在极端相对论情形下 ($\varepsilon\gg m$)，光电效应截面在小角度($\theta\sim$

$\sqrt{1-v^2}$)有一尖峰，即电子主要在光子的入射方向上发射．在峰值附近，

$$1-v\cos\theta\approx\frac{1}{2}[(1-v^2)+\theta^2],$$

式(57.8)的首项给出

$$d\sigma\approx 4Z^5\alpha^4 r_e^2\frac{(1-v^2)^{3/2}\theta^3}{(1-v^2+\theta^2)^3}d\theta d\varphi. \tag{57.9}$$

式(57.8)对角度的积分是初等积分，但很冗长；积分给出如下的总截面公式(F. Sauter, 1931)：

$$\sigma=2\pi Z^5\alpha^4 r_e^2\frac{(\gamma^2-1)^{3/2}}{(\gamma-1)^5}\left\{\frac{4}{3}+\frac{\gamma(\gamma-2)}{\gamma+1}\left(1-\frac{1}{2\gamma\sqrt{\gamma^2-1}}\ln\frac{\gamma+\sqrt{\gamma^2-1}}{\gamma-\sqrt{\gamma^2-1}}\right)\right\}, \tag{57.10}$$

为简单起见，式中引入了"洛伦兹因子"

$$\gamma=\frac{1}{\sqrt{1-v^2}}=\frac{\varepsilon}{m}\approx\frac{m+\omega}{m}. \tag{57.11}$$

在极端相对论情形下，这个公式简化为

$$\sigma=2\pi Z^5\alpha^4 r_e^2\frac{1}{\gamma}. \tag{57.12}$$

在 $I\ll\omega\ll m$ 的情形下，式(57.10)中的 $\gamma-1$ 很小，其极限值给出我们已知的结果(56.14)．

## § 58. 氘核的光致蜕变

氘核的一个特点是它的结合能小(与势阱深度相比)．这种情况使我们在描述有氘核参加的反应时不必仔细了解核力的行为，仅仅利用结合能就够了（参看第三卷 § 133)．这时假定碰撞粒子的波长大于核力的作用半径 $a$.

这也适用于 $ka\ll 1$ 的 $\gamma$ 量子引起的氘核的光致蜕变．同时还假定 $pa\ll 1$，$p$ 为所释放的中子和质子相对运动的动量(这个条件

比 $ka \ll 1$ 更强①).

将光电效应截面的非相对论公式 (56.5) 对所有方向积分,得

$$\sigma = \frac{e^2 p}{2\pi\omega} \frac{M}{2} \frac{4\pi}{3} |(\boldsymbol{v}_p)_{fi}|^2.$$

这里 $p$ 为质子和中子相运动的动量②, 而式(56.5)中的 $m$ 由它们的折合质量 $M/2$ ($M$ 为核子的质量) 代替. 矩阵元为质子速度 $\boldsymbol{v}_p$ 的矩阵元, 因为只有质子与光子有相互作用. 将 $\boldsymbol{v}_p$ 用动量 $\boldsymbol{p}$ 表示($\boldsymbol{v}_p = \boldsymbol{v}/2 = \boldsymbol{p}/M$), 我们有

$$\sigma^{(\text{电})} = \frac{e^2 p}{3M\omega} |\boldsymbol{p}_{fi}|^2. \tag{58.1}$$

指标(电)表示这个公式对应于电偶极跃迁: $e\boldsymbol{p}/M = e\boldsymbol{v}_p = \boldsymbol{d}$, 因而 $e\boldsymbol{p}_{fi}/M = i\omega\boldsymbol{d}_{fi}$.

氘核初态(基态)的归一化波函数为

$$\psi = \sqrt{\frac{\kappa}{2\pi}} \frac{e^{-\kappa r}}{r}, \qquad \kappa = \sqrt{MI}, \tag{58.2}$$

这里的 $I = 2.23$ MeV 为结合能 (参看第三卷 § 133)③. 终态波函数可以取为自由运动的波函数, 即平面波

$$\psi' = e^{i\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{r}}. \tag{58.3}$$

理由是在我们所考虑的理论中, "氘核的线度" $1/\kappa$ 与相互作用的有效半径 $a$ 相比被认为是很大的. 因而, 质子和中子之间的相互

---

① $\gamma a \approx 1$ ($a = 1.5 \times 10^{-13}$ cm) 时光子的能量为 15 MeV.

② 在本节中, $p$ 代表 $|\boldsymbol{P}|$.

③ 引入一个与 $a$ 的有限性相关的修正, 可以使这个函数更准确些. 为此, 用

$$\sqrt{\frac{\kappa}{2\pi(1-a\kappa)}}$$

代替(58.2)中的归一化系数就行了[参看第三卷(133,13)]. 相应地, 在截面公式中也要出现因子 $1/(1-a\kappa)$. 应该说, 这个修正实际上是很大的: 对于氘核基态, $a\kappa \approx 0.4$.

氘核基态是 $^3S_1$ 态与少量 $^3D_1$ 态的"混合", 这是由于张量核力作用的结果(参看第三卷 § 117). 我们将不考虑这种混合, 因而将忽略张量力.

作用只在 $S$ 态中才必须考虑，而在 $l\neq0$ 的态中被略去．$l\neq0$ 的态的波函数在小距离上很小．然而按照选择定则，两个 $S$ 态(基态和连续谱的 $S$ 态) 之间的电偶极跃迁是禁止的，所以在此种情形下就有可能忽略终态中核子的相互作用．

利用分部积分法可以求出矩阵元

$$\boldsymbol{p}_{fi}=-\mathrm{i}\sqrt{\frac{\kappa}{2\pi}}\int \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{r}}\Delta\frac{e^{-\kappa r}}{r}\mathrm{d}^3x=\sqrt{\frac{\kappa}{2\pi}}\,\boldsymbol{p}\left(\frac{e^{-\kappa r}}{r}\right)_{\boldsymbol{p}}$$

$$=\sqrt{\frac{\kappa}{2\pi}}\frac{4\pi\boldsymbol{p}}{p^2+\kappa^2}$$

(参看第 250 页的第二个注解)．

注意到表达能量守恒的等式

$$\frac{1}{M}(\kappa^2+\boldsymbol{p}^2)=I+\frac{\boldsymbol{p}^2}{M}=\omega.$$

最后我们得到光致蜕变的截面(通常的单位)

$$\sigma^{(电)}=\frac{8\pi}{3}\alpha\frac{\hbar^2}{M}\frac{\sqrt{I}\,(\hbar\omega-I)^{3/2}}{(\hbar\omega)^3} \tag{58.4}$$

(H. A. Bethe, R. Peierls, 1935)．当 $\hbar\omega=2I$ 时，它有极大值；而当 $\hbar\omega\to I$ 或 $\hbar\omega\to\infty$ 时，它趋于零．

然而，公式(58.4)所描述的光子的电偶极吸收对光电阈附近($\hbar\omega$ 接近于 $I$ ) 的截面没有多大贡献．这是因为：在这个区域内，主效应来自向$S'$态的跃迁，而在电偶极吸收中不产生这种跃迁．在电四极吸收中也不出现这种跃迁：虽然在这种情形下向 $S'$ 态的跃迁并不违反有关宇称的选择定则，但却为轨道角动量的选择定则所不容(因为我们忽略了张量力，所以 $\boldsymbol{L}$ 和 $\boldsymbol{S}$ 分别守恒)．因而，为了计算阈值附近的光致蜕变截面，我们必须考虑磁偶极吸收，磁偶极吸收所遵守的选择定则容许 $S$ 态之间的跃迁 (E. Fermi, 1935)．

在公式(58.1)中用磁矩代替电矩，我们有

$$\sigma^{(磁)} = \frac{1}{3}\omega M p |\mu_{fi}|^2. \tag{58.5}$$

由于轨道角动量 $\boldsymbol{L}$ 对 $S$ 态之间的跃迁没有矩阵元，轨道运动的磁矩对 $\mu_{fi}$ 没有贡献. 自旋磁矩

$$\boldsymbol{\mu} = 2\mu_p \boldsymbol{s}_p + 2\mu_n \boldsymbol{s}_n = 2(\mu_p - \mu_n)\boldsymbol{s}_p + 2\mu_n \boldsymbol{S}.$$

式中 $\boldsymbol{S} = \boldsymbol{s}_p + \boldsymbol{s}_n$, $\mu_p$ 和 $\mu_n$ 是质子和中子的磁矩. 当忽略张量核力时，总自旋守恒，因而它的算符不产生跃迁. 所以

$$\mu_{fi} = 2(\boldsymbol{s}_p)_{fi}(\mu_p - \mu_n).$$

在同一近似中(忽略张量力)，自旋和坐标变量是分开的. 和波函数一样，矩阵元是自旋部分和坐标部分的乘积:

$$\mu_{fi} = 2(\mu_p - \mu_n)\langle s_p S' M' | \boldsymbol{s}_p | s_p S M \rangle \int \psi'^*(r)\psi(r)\,\mathrm{d}^3x.$$

但是，自旋-自旋核力的存在使坐标函数 $\psi(r)$ 的波动方程包含自旋值 $S$ 作为参数. 若 $S' = S$, 则 $\psi'(r)$ 和 $\psi(r)$ 是同一个算符的本征函数，因而是正交的. 那么，初态 $^3S$ 只能光致蜕变到连续谱的 $^1S$ 态.

当然，(58.5)中的平方 $|\mu_{fi}|^2$ 应该对初态中自旋 $\boldsymbol{S}$ 的分量 $M$ 求平均. 所以问题归结为计算量

$$\frac{1}{2S+1}\sum_M |\langle s_p S' M' | \boldsymbol{s}_p | s_p S M \rangle|^2,$$

这里的 $s_p = s_n = 1/2$, $S = 1$, $S' = 0$. 按照角动量相加时矩阵元的一般公式，这个量等于

$$\frac{1}{(2S+1)(2S'+1)} |\langle s_p S' \| s_p \| s_p S \rangle|^2 =$$

$$= \begin{Bmatrix} s_p & S' & s_n \\ S & s_p & 1 \end{Bmatrix}^2 \quad |\langle s_p \| s_p \| s_p \rangle|^2 = \frac{1}{6} |\langle s_p \| s_p \| s_p \rangle|^2$$

[此处利用了第三卷的公式(107.11), (109.3)]约化矩阵元为

$$\langle s_p \| s_p \| s_p \rangle = \sqrt{s_p(s_p+1)(2s_p+1)} = \sqrt{\frac{3}{2}}.$$

结果，公式(58.5)变成

$$\sigma^{(\text{蜕})} = \frac{1}{3}\omega M_p(\mu_p - \mu_n)^2 \left| \int \psi'^* \psi \mathrm{d}^3 x \right|^2. \qquad (58.6)$$

初态波函数 $\psi$ 由公式(58.2)给出，而终态波函数为

$$\psi' = \frac{1}{2p} R_{p0}(r).$$

这就是函数展开式(56.7)的第一项($l=0$)，该函数的渐近形式中包含一平面波和一入射球面波，略去了不重要的相因子. 因为积分是对核力作用半径以外的区域进行的，所以径向函数为

$$R_{p0}(r) = 2\frac{\sin(pr+\delta)}{r}.$$

相角 $\delta$ 与"质子＋中子"系统在 $S=0$ 时的虚能级值 ($I_1=0.067$ Mev)有关：

$$\operatorname{ctg}\delta = \frac{\kappa_1}{p}, \qquad \kappa_1 = \sqrt{MI_1}$$

(参看第三卷 § 133). 这样一来，

$$\int \psi'^* \psi \mathrm{d}^3 x = (2\pi)^{3/2} \frac{\sqrt{\kappa}}{p\pi} \operatorname{Im} \int \mathrm{e}^{-\kappa r + \mathrm{i}pr} \mathrm{e}^{\mathrm{i}\delta} \mathrm{d}r$$

$$= (2\pi)^{3/2} \frac{\sqrt{\kappa}}{p\pi} \operatorname{Im} \frac{\mathrm{e}^{\mathrm{i}\delta}}{\kappa - \mathrm{i}p}.$$

经过简单的代数变换，我们得到光致蜕变截面的如下表达式(通常的单位)：

$$\sigma^{(\text{蜕})} = \frac{8\pi}{3\hbar c}(\mu_p - \mu_n)^2 \frac{\sqrt{I(\hbar\omega - I)}(\sqrt{I} + \sqrt{I_1})^2}{\hbar\omega(\hbar\omega - I + I_1)}$$

(58.7)

当 $\hbar\omega \to I$ 时，这个截面因$\sqrt{\hbar\omega - I}$而趋于零. 这与反应阈能附近截面行为的一般性质一致(第三卷 § 147).

光致蜕变的逆过程是质子被中子辐射俘获．俘获截面 $\sigma_{俘}$ 可以借助细致平衡原理由光电效应截面 $\sigma_{光}$ 得到[比较（56.15)的推导过程]．中子和质子的自旋统计权重等于 $2\times 2=4$．氘核（在 $S=1$ 的态中)和光子的统计权重等于 $3\times 2=6$．所以

$$\sigma_{俘}=\frac{3}{2}\frac{(\hbar\omega)^2}{c^2 p^2}\sigma_{光}=\frac{3(\hbar\omega)^2}{2Mc^2(\hbar\omega-I)}\sigma_{光}. \qquad (58.8)$$

# 第六章　光的散射

## §59. 散射张量

电子系统(为确切起见，下面我们认为就是原子)对光子的散射包括吸收一个初态光子 $\boldsymbol{k}$,同时发射另一个光子 $\boldsymbol{k}'$. 散射后,原子的状态有两种可能:或仍处在初态能级,或处在某个别的分立能级. 在第一种情形下光子频率不变(**瑞利散射,或非混合散射**),而在第二种情形下,光子频率发生变化:

$$\omega'-\omega=E_1-E_2, \tag{59.1}$$

式中 $E_1$, $E_2$ 为原子的初态能量和终态能量(**组合散射,或混合散射**)①. 如果原子的初态是基态,在组合散射时,$E_2>E_1$,因而 $\omega'<\omega$——散射使频率降低(所谓**斯托克斯**情形). 在受激原子上的散射既可能是斯托克斯情形,又可能是**反斯托克斯**情形($\omega'>\omega$).

由于电磁微扰算符对同时改变两个光子占有数的跃迁没有矩阵元，因而散射效应只出现在微扰论的二级近似中. 必须把散射看成是通过一定的中间态发生的. 中间态可能有两种类型:

I. 光子 $\boldsymbol{k}$ 被吸收,原子跃迁到自己的一个可能状态 $E_n$,接着跃迁到终态,同时发射一个光子 $\boldsymbol{k}'$;

II. 原子发射光子 $\boldsymbol{k}'$ 且跃迁到 $E_n$ 态,接着跃迁到终态,同时吸收一个光子 $\boldsymbol{k}$.

在这个过程中,矩阵元表示为求和[参看第三卷式(43.7)]

$$V_{21}=\sum_n{}'\left(\frac{V'_{2n}V_{n1}}{\mathscr{E}_1-\mathscr{E}_n^{\mathrm{I}}}+\frac{V_{2n}V'_{n1}}{\mathscr{E}_1-\mathscr{E}_n^{\mathrm{II}}}\right) \tag{59.2}$$

① 在这一章里,属于散射系统初态和终态的量分别用指标 1 和 2 表示.

式中“原子＋光子”系统的初态能量是 $\mathscr{E}_1=E_1+\omega$，而中间态能量是

$$\mathscr{E}_n^{\mathrm{I}}=E_n,\quad \mathscr{E}_n^{\mathrm{II}}=E_n+\omega+\omega'.$$

$V_{n1}$ 为吸收光子 $\boldsymbol{k}$ 的矩阵元，$V'_{2n}$ 为发射光子 $\boldsymbol{k}'$ 的矩阵元；对 $n$ 求和不包括初态(由求和号上的撇号表示)．散射截面为

$$\mathrm{d}\sigma=2\pi|V_{21}|^2\frac{\omega'^2\mathrm{d}o'}{(2\pi)^3}. \tag{59.3}$$

这里的 $\mathrm{d}o'$ 为 $\boldsymbol{k}'$ 方向上的立体角元．单位时间内散射到立体角 $\mathrm{d}o'$ 内的光能 $\mathrm{d}I'$ 可以通过入射光强度 $I$ (能流密度)表示如下：

$$\mathrm{d}I'=I\frac{\omega'}{\omega}\mathrm{d}\sigma.$$

我们将假定初、终态光子的波长比散射系统的线度 $a$ 大，因此，所有跃迁都按偶极近似处理．如果用平面波描述光子态，那么这个近似相当于用 1 代替因子 $\mathrm{e}^{\mathrm{i}\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}}$．这时，光子波函数(在三维横向规范中)为

$$\boldsymbol{A}_{e\omega}=\sqrt{4\pi}\frac{\boldsymbol{e}}{\sqrt{2\omega}}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega t},\qquad \boldsymbol{A}_{e'\omega'}=\sqrt{4\pi}\frac{\boldsymbol{e}'}{\sqrt{2\omega'}}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega t}.$$

在上述条件下，电磁相互作用算符可以写成

$$\hat{V}=-\hat{\boldsymbol{d}}\cdot\hat{\boldsymbol{E}}, \tag{59.4}$$

这里 $\hat{\boldsymbol{E}}=-\dot{\hat{\boldsymbol{A}}}$ 为场强算符，$\hat{\boldsymbol{d}}$ 为原子的偶极矩算符 (类似于电场中一个小尺度系统能量的经典表达式——参看第二卷 § 42)．$\hat{V}$ 的矩阵元为

$$V_{n1}=-\mathrm{i}\sqrt{2\pi\omega}(\boldsymbol{e}\cdot\boldsymbol{d}_{n1}),\quad V'_{2n}=\mathrm{i}\sqrt{2\pi\omega'}(\boldsymbol{e}'^*\cdot\boldsymbol{d}_{2n}).$$

把这两个式子代入(59.2)和(59.3)，我们得到散射截面(用通常的单位写出)①：

① 这个公式是 H. A. Kramers和W. Heisenberg 在量子力学建立之前首次导出的(H. A. Kramers, W. Heisenberg, 1925)．

$$d\sigma=\left|\sum_n\left\{\frac{(\boldsymbol{d}_{2n}\cdot\boldsymbol{e}'^*)\cdot(\boldsymbol{d}_{n1}\cdot\boldsymbol{e})}{\omega_{n1}-\omega-io}+\frac{(\boldsymbol{d}_{2n}\cdot\boldsymbol{e})(\boldsymbol{d}_{n1}\cdot\boldsymbol{e}'^*)}{\omega_{n1}+\omega'-io}\right\}\right|^2\frac{\omega\omega'^3}{\hbar^2c^4}do'$$

(59.5)

$$\hbar\omega_{n_1}=E_n-E_1,\ \omega'-\omega=\omega_{12}.$$

求和对所有可能的原子态进行，包括连续谱的态(这时态 1 和态 2 从求和中自然消去，因为对角矩阵元 $\boldsymbol{d}_{11}=\boldsymbol{d}_{22}=0$). 分母中的无限小虚项来自微扰论中通常的极点绕行法则(参看第三卷 § 43)：在求和变量 $E_n$(中间态的能量)上附加一负的无限小虚部；当表达式(59.5)中变量$E_n$的极点落入连续谱区时，绕行规则很重要(例如，若 1 态是原子基态，当 $\hbar\omega$ 超过原子的电离阈值时，就出现这种情况)①

我们引入符号(通常的单位)②

$$(c_{ik})_{21}=\frac{1}{\hbar}\sum_n\left[\frac{(d_i)_{2n}(d_k)_{n1}}{\omega_{n1}-\omega-\mathrm{i}0}+\frac{(d_k)_{2n}(d_i)_{n1}}{\omega_{n1}+\omega'-\mathrm{i}0}\right] \tag{59.6}$$

($i,k=x,y,z$ 为三维矢量指标). 利用这个符号，公式(59.5)可以改写成

$$d\sigma=\frac{\omega(\omega+\omega_{12})^3}{c^4}|(c_{ik})_{21}e_i'^*e_k|^2do'. \tag{59.7}$$

符号(59.6)的好处在于能将这个求和表示成某个张量的矩阵元. 最简单的证明方法是定义一个矢量 $\boldsymbol{b}$，其算符满足方程

$$i\dot{\hat{\boldsymbol{b}}}+\omega\hat{\boldsymbol{b}}=\hat{\boldsymbol{d}};$$

它的矩阵元为

$$\boldsymbol{b}_{n1}=\frac{\boldsymbol{d}_{n1}}{\omega-\omega_{n1}},\quad \boldsymbol{b}_{2n}=\frac{\boldsymbol{d}_{2n}}{\omega+\omega_{n2}},$$

---

① 对分子而言，电离阈就是离解成原子的阈能.

② 以下 § 59—— § 61 中所引用的大部分结果来自 G. Placzek 的工作(G. Placzek, 1931—1933).

结果有

$$(c_{ik})_{21}=(b_k d_i-d_i b_k)_{21}. \tag{59.8}$$

我们将把矩阵元$(c_{ik})_{21}$叫做光的**散射张量**.

由此可以得出，散射的选择定则与任意二秩张量的矩阵元的选择定则相同. 我们立即就能看到，如果系统具有对称中心(因而它的态可以按宇称分类)，那么跃迁只能发生在宇称相同的态之间(其中包括没有态变的跃迁). 这个定则与(电偶极)辐射的宇称选择定则相反，因而产生交错禁戒：在辐射中所容许的跃迁在散射中是禁止的，而散射中所容许的在辐射中却是禁止的.

张量 $c_{ik}$ 可以分解成几个不可约的部分：

$$c_{ik}=c^0\delta_{ik}+c^s_{ik}+c^a_{ik}. \tag{59.9}$$

式中

$$\left.\begin{aligned}
c^0&=\frac{1}{3}c_{ii},\\
c^s_{ik}&=\frac{1}{2}(c_{ik}+c_{ki})-c^0\delta_{ik},\\
c^a_{ik}&=\frac{1}{2}(c_{ik}-c_{ki})
\end{aligned}\right\} \tag{59.10}$$

分别为标量、对称张量（迹等于0）和反对称张量，它们的矩阵元为

$$(c^0)_{21}=\frac{1}{3}\sum_n\frac{\omega_{n1}+\omega_{n2}}{(\omega_{n1}-\omega)(\omega_{n2}+\omega)}(d_i)_{2n}(d_i)_{n1} \tag{59.11}$$

$$(c^s_{ik})_{21}=\frac{1}{2}\sum_n\frac{\omega_{n1}+\omega_{n2}}{(\omega_{n1}-\omega)(\omega_{n2}+\omega)}\times[(d_i)_{2n}(d_k)_{n1}+(d_k)_{2n}(d_i)_{n1}]-(c^0)_{21}\delta_{ik}, \tag{59.12}$$

$$(c^a_{ik})_{21}=\frac{2\omega+\omega_{12}}{2}\sum_n\frac{(d_i)_{2n}(d_k)_{n1}-(d_k)_{2n}(d_i)_{n1}}{(\omega_{n1}-\omega)(\omega_{n2}+\omega)} \tag{59.13}$$

(为简单起见，略去了极点绕行符号).

让我们来研究在低频光子和高频光子的极限情形中散射张量的一些性质①.

对于非混合散射($\omega_{12}=0$)，当 $\omega\to 0$ 时张量的反对称部分趋于零[由于式(59.13)中求和号前 $\omega$ 的存在]，但是，当 $\omega\to 0$ 时散射张量的标量部分和对称部分趋于有限值. 因而，当 $\omega$ 很小时，截面与 $\omega^4$ 成正比.

在相反的情形下，当频率 $\omega$ 比式(59.6)中的所有重要的频率 $\omega_{n1}, \omega_{n2}$ 都大时(当然仍应保证波长$\gg a$)，应该回到经典理论的公式. 散射张量若按 $1/\omega$ 的幂次展开，展开式的第一项等于

$$\frac{1}{\omega}\sum_n[(d_k)_{2n}(d_i)_{n1}-(d_i)_{2n}(d_k)_{n1}]=\frac{1}{\omega}(d_kd_i-d_id_k)_{21}$$

且为零，因为 $\hat{d}_i, \hat{d}_k$ 对易. 展开式的第二项为

$$(c_{ik})_{21}=\frac{1}{\omega^2}\sum_n[\omega_{2n}(d_k)_{2n}(d_i)_{n1}-(d_i)_{2n}\omega_{n1}(d_k)_{n1}]$$

$$=\frac{1}{i\omega^2}(\dot{d}_kd_i-d_i\dot{d}_k)_{21}$$

根据定义 $\boldsymbol{d}=\Sigma e\boldsymbol{r}$(求和是对原子中的所有电子) 和动量与坐标之间的对易法则，我们得到

$$(c_{ik})_{11}=-\frac{Ze^2}{m\omega^2}\delta_{ik}, \qquad (c_{ik})_{21}=0, \tag{59.14}$$

式中 $Z$ 为系统中的总电子数，$m$ 为一个电子的质量. 这样一来，在高频极限下，散射张量中只剩下标量部分，而且散射时系统状态不变(即散射是完全相干的，参看下面). 在这种情形下，散射截面为

$$d\sigma=r_e^2Z^2|\boldsymbol{e}'^*\cdot\boldsymbol{e}|^2do', \tag{59.15}$$

式中，$r_e=e^2/m$. 对终态光子的极化求和后，我们得到公式

$$d\sigma=r_e^2Z^2\{1-(\boldsymbol{e}\cdot\boldsymbol{n}')^2\}do'=r_e^2Z^2\sin^2\theta\cdot do', \tag{59.16}$$

---

① 共振情形($\omega$ 接近 $\omega_{n1}$ 或 $\omega_{2n}$)将在 §63 中研究.

这实际上就是第二卷中的经典汤姆逊公式（80.7）($\theta$ 为散射方向和入射光子极化矢量之间的夹角).

我们来研究 $N$ 个全同原子的集合引起的光的散射. 这些原子处在线度小于波长的区域内. 相应的散射张量将等于每个原子的散射张量之和. 然而必须注意，同时考虑的若干个相同原子的波函数(常用来计算偶极矩的矩阵元)不能认为是同一函数. 波函数就其本质而言，只能确定到任意相因子的程度，即每个原子都有各自不同的相因子. 散射截面应该分别对每个原子的相因子求平均.

每个原子的散射张量$(c_{ik})_{21}$都含因子 $e^{i(\varphi_1-\varphi_2)}$,$\varphi_1$ 和 $\varphi_2$ 是初态和终态波函数的相位. 对混合散射来说，态 1 和态 2 是不同的，这个因子不等于 1. 在模的平方

$$|e_i'^* e_k \Sigma (c_{ik})_{21}|^2$$

中(求和对全部 $N$ 个原子)，属于不同原子的各项之积将包含这样一些相因子，当对各原子的相位独立地求平均时，这些相因子为零，因而只剩下每一项的平方模. 这意味着，$N$ 个原子的散射总截面是一个原子的散射截面的 $N$ 倍(散射是不相干的).

如果原子的初、终态相同，那么因子 $e^{i(\varphi_1-\varphi_2)}=1$. 在这种情形下，一簇原子的散射振幅将是一个原子的散射振幅的 $N$ 倍，从而散射截面将差一个因子 $N^2$(散射是相干的)①. 如果原子能级是非简并的，那么非混合散射将是完全相干的. 如果能级是简并的，那么由于原子在各种相互简并的态之间跃迁，将会产生不相干非混合散射. 这是一种纯量子效应. 在经典理论中，频率不变的散射总是相干散射.

相干散射张量由对角化矩阵元$(c_{ik})_{11}$给出，记做 $\alpha_{ik}$(为简单

---

① 我们看到，公式(59.15)和(59.16)中的因子 $Z^2$ 的来源相同：一个原子中 $Z$ 个电子相干散射的截面为一个电子散射截面的 $Z^2$ 倍.

起见，略去了表示原子状态的指标）. 按照公式(59.6)，

$$\alpha_{ik}(\omega)\equiv(c_{ik})_{11}=\sum_n\left[\frac{(d_i)_{1n}(d_k)_{n1}}{\omega_{n1}-\omega-\mathrm{i}0}+\frac{(d_k)_{1n}(d_i)_{n1}}{\omega_{n1}+\omega-\mathrm{i}0}\right] \quad (59.17)$$

这个表达式也可以写成

$$\alpha_{ik}(\omega)=\frac{e^2}{m\omega^2}\left\{-Z\delta_{ik}+\frac{1}{m}\sum_n\left[\frac{(p_i)_{1n}(p_k)_{n1}}{\omega_{n1}-\omega-\mathrm{i}0}+\frac{(p_k)_{1n}(p_i)_{n1}}{\omega_{n1}+\omega-\mathrm{i}0}\right]\right\}, \quad (59.18)$$

极限表达式(59.14)是由此式分离出去的．在这里，$\boldsymbol{p}$ 为一个原子中电子的总动量．注意到动量矩阵元和偶极矩矩阵元之间的关系式

$$e\boldsymbol{p}_{1n}/m=\mathrm{i}\omega_{1n}\boldsymbol{d}_{1n},$$

并利用推导(59.14)时用过的关系式，就不难看出上述两个公式的等价性．

如果 $E_1\pm\omega$ 与任何一个原子能级 $E_n$(其中包括连续谱区域内的能级）都不相等，则分母中的 i0 项就可以略去．既然 $p^*_{1n}=p_{n1}$，就可以将张量 $\alpha_{ik}$ 看成是厄密的①：

$$\alpha_{ik}=\alpha^*_{ki}. \quad (59.19)$$

这意味着它的标量部分和对称部分是实的，而反对称部分是虚的．如果原子处于非简并态，反对称部分显然等于零．这种状态的波函数是实的，从而对角矩阵元也是实的．

张量 $\alpha_{ik}$ 与原子在外电场中的极化度有关系．为了确定这种关系，对处在外电场

$$\frac{1}{2}(\boldsymbol{E}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega t}+\boldsymbol{E}^*\mathrm{e}^{\mathrm{i}\omega t}) \quad (59.20)$$

① 这个结果是由于忽略了光谱线的自然宽度，即忽略了入射光被吸收的可能性——参看§62.

中的系统，我们来计算其偶极矩平均值的修正值．为此，可以利用已知的微扰论公式(参看第三卷 § 40)．如果作用在系统上的微扰为

$$\hat{V}=\hat{F}e^{-i\omega t}+\hat{F}^{+}e^{i\omega t},$$

那么，对某个量 $f$ 的对角矩阵元的一级修正等于

$$f_{11}^{(1)}(t)=-\sum_{n}\left\{\left[\frac{f_{1n}^{(0)}F_{n1}}{\omega_{n1}-\omega-i0}+\frac{f_{n1}^{(0)}F_{1n}}{\omega_{n1}+\omega+i0}\right]e^{-i\omega t}+\left[\frac{f_{1n}^{(0)}F_{1n}^{*}}{\omega_{n1}+\omega-i0}+\frac{f_{n1}^{(0)}F_{n1}^{*}}{\omega_{n1}-\omega+i0}\right]e^{i\omega t}\right\}$$

(微扰 $\hat{V}$ 应该看成是从 $t=-\infty$时无限缓慢地加上的，因而在第一项中 $\omega$ 应该理解成 $\omega+i0$，而在第二项中理解成 $\omega-i0$; 分母中的虚数项就是据此加入的)．

在现在的情形下，$\hat{F}=-\boldsymbol{d}\cdot\boldsymbol{E}/2$，偶极矩对角矩阵元的修正为

$$\boldsymbol{d}_{11}^{(1)}=\frac{1}{2}(\overline{\boldsymbol{d}}e^{-i\omega t}+\overline{\boldsymbol{d}}^{*}e^{i\omega t}),\tag{59.21}$$

式中的$\overline{\boldsymbol{d}}$是一个矢量，它的分量为

$$\bar{d}_{i}=\alpha_{ik}^{(极)}E_{k},\tag{59.22}$$

张量 $\alpha_{ik}^{(极)}(\omega)$ 的表达式不同于 $\alpha_{ik}$ 的表达式(59.17)，区别是第二项分母中的虚数项符号相反．按照定义，$\alpha_{ik}^{(极)}(\omega)$是原子在频率为 $\omega$ 的场中的极化张量．若频率值可使分母中的虚数项略去，使张量 $\alpha_{ik}$ 成为厄密的，则张量 $\alpha_{ik}$ 和 $\alpha_{ik}^{(极)}$ 彼此相合．特别是当 $\omega=0$ 时，公式(59.22)就变成第三卷中的公式(76.4)，而由(59.17)得到的 $\alpha_{ik}(0)$就与第三卷中静态极化张量的表达式(76.5)相同．我们还会看到，如果 1 态是基态①，则所有的 $\omega_{n1}>0$，(59.17) 中第一项

① 因为激发态寿命有限，所以只有这种情形(以后我们将遇到)才能进行精确处理．参看下面 § 62.

的绕行规则只有当 $\omega>0$ 时才是重要的，而第二项的绕行规则只在 $\omega<0$ 时才重要. 在这种情形下，

$$\alpha_{ik}(\omega)=\alpha_{ik}^{(极)}(|\omega|). \tag{59.23}$$

散射理论的公式无疑有 $\omega>0$，因此，张量 $\alpha_{ik}$ 就是极化张量.

除了截面，后面我们还需要知道光子的散射振幅 $f$. 像通常在微扰论中那样，它和取相反符号的矩阵元 (59.2)只差一个归一化因子. 归一化因子的选取应该使截面 (59.7) 能够成写 $d\sigma=|f|^2 d0'$ 的形式. 对于弹性散射振幅，我们有

$$f=\omega^2\alpha_{ik}e_i'^*e_k. \tag{59.24}$$

按照光学定理[参看下面的公式(71.10)]，向前散射振幅(即动量和极化都不变）的虚部决定一切可能的弹性和非弹性过程的总截面 $\sigma_t$(对给定的光子初态)：

$$\sigma_t=\frac{4\pi}{\omega}\mathrm{Im}(\omega^2\alpha_{ik}e_i^*e_k)=4\pi\omega\frac{\alpha_{ik}-\alpha_{ki}^*}{2i}e_i^*e_k. \tag{59.25}$$

由此可见，总截面由散射张量的反厄密部分决定.

公式(29.15) 具有简单的经典意义：电场 $\boldsymbol{E}$ 在单位时间内对电荷系所做的功等于 $\Sigma e\boldsymbol{v}\cdot\boldsymbol{E}=\boldsymbol{E}\cdot\dot{\boldsymbol{d}}$. 把场写成(59.20)的形式，而把偶极矩写成(59.21)和(59.22)的形式，将这个功对时间求平均，我们得到

$$\frac{1}{2}\omega|E|^2e_i^*e_k\frac{\alpha_{ik}-\alpha_{ki}^*}{2i}$$

$(\boldsymbol{E}=\boldsymbol{e}E)$. 另一方面，如果 $\boldsymbol{E}$ 是入射光的场，则平均能流密度等于 $|E^2|/8\pi$，而原子所吸收的能量等于

$$\frac{1}{8\pi}|E|^2\sigma_t.$$

令上面所得到的两式彼此相等，我们便得到公式(59.25).

如果原子基态的角动量 $J$ 等于零，由于球对称性，$\alpha_{ik}=\alpha\delta_{ik}$，因而

$$\sigma_t = 4\pi\omega \operatorname{Im}\alpha. \tag{59.26}$$

对于角动量不为零的系统，在角动量的空间方向上取平均的那些量也具有同样的关系式(参看 § 60).

当光子能量超过原子的电离阈时，对总截面 $\sigma_t$ 的主要贡献来自电离过程（在光电效应中吸收光子），散射截面是 $e^2$ 的高阶量[比较(56.13)和(59.16)].

如果光子的能量低于电离阈(但又离共振较远，就是说离原子的任何一个分立的激发频率较远)，那么截面(此时可化为散射截面)和振幅的虚部，与振幅的实部相比，是更高阶小量. 如果略去虚部，我们重新得到(59.19). 在共振附近就不同了；在那里截面增大，这种情形将在 § 63 中讨论.

和散射一样，二级微扰论中出现的双光子过程也包括二重发射，即一个原子同时发射两个光子.

这个过程的几率表达式与公式(59.5)的区别仅仅是作了代换 $\omega\to-\omega, \boldsymbol{e}\to\boldsymbol{e}^*$(发射光子 $\omega$ 而不是吸收)和一个多余因子

$$\frac{d^3k}{(2\pi)^3}=\frac{\omega^2 d\omega do}{(2\pi)^3},$$

这是在频率 $\omega$ 和方向 $\boldsymbol{k}$ 的已知间隔内所发射的光子的量子态数. 第二个光子的频率 $\omega$ 由等式 $\omega+\omega'=\omega_{12}$ 决定. 因此，在单位时间内的发射几率为①

$$dw=|(b_{ik})_{21}e'^*_i e^*_k|^2\frac{\omega^3\omega'^3}{(2\pi)^3c^6\hbar^2}do\,do'd\omega, \tag{59.27}$$

式中

$$(b_{ik})_{21}=\sum_n\left[\frac{(d_i)_{2n}(d_k)_{n1}}{\omega_{n1}+\omega-i0}+\frac{(d_k)_{2n}(d_i)_{n1}}{\omega_{n1}+\omega'-i0}\right]$$

与公式(59.6)中 $(c_{ik})_{21}$ 的区别只是 $\omega$ 前的符号改变. 此式对光子

① 在这里和本节的后半部分都是用通常的单位.

的极化求和并对它们的发射方向积分①，我们得到

$$dw=\frac{8\omega^3\omega'^3}{9\pi\hbar^2c^6}|(b_{ik})_{21}|^2d\omega. \tag{59.28}$$

与发射频率为$\omega+\omega'$的单一光子的几率比较，发射频率分别为$\omega$和$\omega'$的两个光子的几率通常是十分小的. 选择定则禁止单光子发射过程而又允许发射双光子时，出现例外情形. 例如，$J=0$的两个状态之间的跃迁就是这样的. 在这个例子中，发射一个光子的任何过程都被严格禁止. 另一个例子是从氢原子的第一激发态$(2s_{1/2})$到基态$(1s_{1/2})$的跃迁. 不论是对$E1$-辐射，还是对$M1$辐射，这个过程都被禁止(参看§52的习题2)②.

如果原子处于入射光子$(\omega,\boldsymbol{k})$流的场中，那么除了自发二重发射外[它的几率为(59.27)]，还存在受激二重发射：在场的影响下除了发射一个$\omega',\boldsymbol{k}'$光子外，还发射一个和外场一样的光子. 这个过程的几率与自发发射的几率相差一个因子$N_{\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{e}}$，它是$\boldsymbol{k}$、$\boldsymbol{e}$已知的入射光的光子数密度. 入射光子流密度为

$$dI=cN_{\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{e}}\frac{d^3k}{(2\pi)^3}=N_{\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{e}}\frac{\omega^2}{8\pi^3c^2}d\omega do.$$

用$dI$表示$N_{\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{e}}$并用$dI$去除过程的几率，我们得到它的截面

$$d\sigma=\frac{\omega\omega'^3}{\hbar^2c^4}|(b_{ik})_{12}e_i'^*e_k^*|^2do'. \tag{59.29}$$

类似地，如果原子处在$\omega',\boldsymbol{k}'$光子的场中，那么当$\omega,\boldsymbol{k}$光子入射在它上面时，就会产生受激组合散射，其截面与$\omega',\boldsymbol{k}'$的光子数密度成正比.

对具体原子计算张量$(c_{ik})_{12}$或$(b_{ik})_{12}$时，要求计算如下形式的求和:

---

① 这个运算就是通过$\overline{e_ie_k^*}=\frac{1}{3}\delta_{ik}$完成对方向$\boldsymbol{e}$的总平均，再连乘以$2\cdot2\cdot4\pi\cdot4\pi$.

② 对于二重发射，能级$2s_{1/2}$的寿命约为0.15秒.

$$(M_{ik}^{(2)})_{21} = \sum_n \frac{(d_i)_{2n}(d_k)_{n1}}{E_n - E - \mathrm{i}0}, \tag{59.30}$$

$E$ 的取值为 $E_1 \pm \hbar\omega$ 或 $E_1 \pm \hbar\omega'$. 为了简化书写，假定我们讨论的是氢原子．我们把式(59.30)的求和写成积分形式：

$$(M_{ik}^{(2)})_{21} = \int \psi_2^*(\boldsymbol{r}) d_i G(\boldsymbol{r}, \boldsymbol{r}'; E) d'_k \psi_1(\boldsymbol{r}') \mathrm{d}^3x \mathrm{d}^3x', \tag{59.31}$$

式中

$$G(\boldsymbol{r}, \boldsymbol{r}'; E) = \sum_n \frac{\psi_n(\boldsymbol{r}) \psi_n^*(\boldsymbol{r}')}{E_n - E - \mathrm{i}0}. \tag{59.32}$$

令算符 $\hat{H} - E$ 作用在函数 $G$ 上，$\hat{H}$ 为原子的哈密顿算符．由于 $\hat{H}\psi_n = F_n\psi_n$，我们得到

$$(\hat{H} - E)G = \sum_n \psi_n(\boldsymbol{r}) \psi_n^*(\boldsymbol{r}').$$

由于函数系 $\psi_n$ 的完备性，这里的求和为 $\delta$ 函数 $\delta(\boldsymbol{r} - \boldsymbol{r}')$．所以，函数 $G$ 满足方程

$$(\hat{H} - E)G(\boldsymbol{r}, \boldsymbol{r}'; E) = \delta(\boldsymbol{r} - \boldsymbol{r}'), \tag{59.33}$$

即函数 $G$ 是薛定谔方程的格林函数［式(59.32)的绕行规则决定了这个方程的解应该如何选取）．这样，式(59.30) 的求和问题就归结为求原子的格林函数．然而，只有当齐次薛定谔方程的精确解已知时，才可能有方程(59.33)的精确解．所以，实际上只能对氢原子写出方程(59.33)的精确解①.

## 习　　题

计算电子(非相对论性的) 对近似单色光驻波的弹性散射的几率(П. Л. Капица, P. A. M. Dirac, 1933)．

---

① 参看 Hostler L. // J. *Math. Phys*. 1964, Vol. 5, p591. 应用这个格林函数计算氢原子的散射振幅，请参看 Грановский Я. И. // жэтф. 1969, Т. 56,, С. 605.

**解** 驻波可以看成是动量为 $\boldsymbol{k}$ 和 $-\boldsymbol{k}$ 而具有相同极化的光子的组合. 电子的散射可以看成吸收一个动量为 $\boldsymbol{k}$ 的光子和受激发射一个动量为 $-\boldsymbol{k}$ 的光子. 结果,电子的动量 $\boldsymbol{p}$ 增加 $2\hbar\boldsymbol{k}$ 并转过一个角度 $\theta$ (大小不变),$\theta$ 满足关系 $|\boldsymbol{p}|\sin\frac{\theta}{2}=\frac{\hbar\omega}{c}$. 这个过程的几率可由汤姆逊散射截面(59.15)

$$d\sigma=r_e^2|\boldsymbol{e}'^*-\boldsymbol{e}|^2do'=r_e^2do'$$

乘以动量为 $\boldsymbol{k}$ 的光子流密度和动量为 $-\boldsymbol{k}$ 的光子数得到.

频率在 $d\omega$ 内的光子流密度等于

$$\frac{cU_\omega d\omega}{2\hbar\omega},$$

这里 $U_\omega d\omega$ 为驻波在谱间隔 $d\omega$ 内的能量密度 (因子 1/2 是考虑到波的能量被在相反方向上运动的光子平分). 形成驻波的所有光子的动量 $\boldsymbol{k}$ 都平行于一定的方向 $\boldsymbol{n}$ (驻波的"方向"). 换句话说, 能量密度是频率和光子方向 $\boldsymbol{n}'$ 的函数: $U_{\omega\boldsymbol{n}'}=U_\omega\delta^{(2)}(\boldsymbol{n}'-\boldsymbol{n})$. 因此,动量为 $-\boldsymbol{k}$ 的光子数等于

$$\int N_{-\boldsymbol{k}}do'=\frac{8\pi^3c^3}{\hbar\omega^3}\frac{U_\omega}{2}$$

[比较(44,8)]. 因而我们得到单位时间内电子的散射几率为

$$w=\frac{2\pi^3e^4}{m^2\hbar^2\omega^4}\int U_\omega^2 d\omega.$$

由于已假定非单色性 $\Delta\omega$ 很小,故将因子 $\omega^{-4}$ 提到积分号外. 积分的大小与 $\Delta\omega$ 成反比(对给定的总强度而言).

## §60. 自由取向系统的散射

如果原子的能级不是简并的, 则相干散射的极化度和强度由同一张量 $\alpha_{ik}\equiv(c_{ik})_{11}$ 决定. 但如果能级是简并的, 则这两个量的观察值由求该能级所有状态的平均而得到. 极化度应定义为平均值

$$\alpha_{ik}=\overline{(c_{ik})_{11}},$$

所观察到的散射强度由乘积的平均值决定:

$$\overline{(c_{ik})_{11}(c_{lm})_{11}}.$$

由此可见,极化度和散射之间的关系变得更间接.

我们看到，虽然每个$(c_{ik})_{11}$可能是复数，它们的平均值却是实数（假定没有吸收，$\alpha_{ik}$为厄密张量）. 实际上，求平均时可以任意选择（和已知简并能级相对应的）一组独立的波函数，这时总可以使所有的函数为实数.

对于未处在外场中的自由原子或自由分子而言，能级的简并通常是由于角动量在空间自由取向而引起的. 设散射时初态的角动量为$J_1$，而终态的为$J_2$. 和通常一样，散射截面应该对所有的$M_1$分量值求平均，并对$M_2$值求和. 求平均后，截面不再依赖于$M_2$，因而，紧接着的求和等价于乘以$(2J_2+1)$. 所以，平均散射截面是

$$d\bar{\sigma}=\omega\omega'^3 c_{iklm}^{(21)} e_i'^* e_k e_l' e_m^* do', \tag{60.1}$$

式中

$$c_{iklm}^{(21)}=\frac{1}{2J_1+1}\sum_{M_1M_2}(c_{ik})_{21}(c_{lm})_{21}^*=(2J_2+1)\overline{(c_{ik})_{21}(c_{lm})_{21}^*}^{1}, \tag{60.2}$$

带指标1的横线表示对$M_1$求平均.

对于非混合散射，态1和态2属于同一能级$(\omega_{12}=0)$. 如果只考虑相干散射，态1和态2必定完全相同，所以$M_1=M_2$. 在这种情形下，对$M_2$的求和以及式(60.2)中的因子$2J_2+1$不再出现：

$$c_{iklm}^{\text{相干}}=\overline{(c_{ik})_{11}(c_{lm})_{11}^*}^{1}. \tag{60.3}$$

毋须进一步计算就可以写出平均的结果，因为对$M_1$平均等价于对系统的所有取向平均，平均值只能通过单位张量$\delta_{ik}$表示出来. 这时，只有散射张量的标量部分、对称部分和反对称部分的分量之积的平均值可以分别不为零. 显然，利用单位张量不能组成具有交叉乘积对称性的表达式，故有

$$c_{iklm}^{(21)}=G_{21}^0\delta_{ik}\delta_{lm}+c_{iklm}^{(21)s}+c_{iklm}^{(21)a}, \tag{60.4}$$

式中

$$\left.\begin{aligned}G^0_{21}&=(2J_2+1)\overline{|(c^0)_{21}|^2}^1,\\c^{(21)s}_{iklm}&=(2J_2+1)\overline{(c^s_{ik})_{21}(c^s_{lm})^*_{21}}^1,\\c^{(21)a}_{iklm}&=(2J_2+1)\overline{(c^a_{ik})_{21}(c^a_{lm})^*_{21}}^1.\end{aligned}\right\}\qquad(60.5)$$

换句话说，自由取向系统的散射截面(以及散射强度）可以分解为三个独立部分之和，我们将称之为**标量散射，对称散射和反对称散射**.

式 (60.4) 中的每一项都可用一个独立量表示：标量散射用 $G^0_{21}$；而对于对称散射和反对称散射，我们有

$$\left.\begin{aligned}c^{(21)s}_{iklm}&=\frac{1}{10}G^s_{21}\left(\delta_{il}\delta_{km}+\delta_{im}\delta_{kl}-\frac{2}{3}\delta_{ik}\delta_{lm}\right),\\G^s_{21}&=(2J_2+1)\overline{(c^s_{ik})_{21}(c^s_{ik})_{21}}^1;\\G^{(21)a}_{iklm}&=\frac{1}{6}G^a_{21}(\delta_{il}\delta_{km}-\delta_{im}\delta_{kl}),\\G^a_{21}&=(2J_2+1)\overline{(c^a_{ik})_{21}(c^a_{ik})_{21}}^1\end{aligned}\right\}\qquad(60.6)$$

(单位张量的组合根据对称性导出，公因子由成对指标 $i, l$ 和 $k, m$ 的缩并求出).

将公式(60.4)—(60.6)代入(60.1)，就得到散射截面的表达式：

$$\begin{aligned}d\bar{\sigma}=\omega\omega'^3\Big\{&G^0_{21}|e'^*\cdot e|^2+\frac{1}{10}G^s_{21}\left(1+|e'\cdot e|^2-\frac{2}{3}|e'^*\cdot e|^2\right)\\&+\frac{1}{6}G^a_{21}(1-|e'\cdot e|^2)\Big\}do'.\end{aligned}\qquad(60.7)$$

从这个公式可以明显地看出散射的角度相关性和极化性质.

通过对终态光子的极化求和并对初态光子的极化与入射方向求平均，不难从式(60.1)直接得出在各个方向上散射的总截面. 为此我们注意到，如果不仅对光子的极化平均，而且对光子的传播方向平均，则有

$$\overline{e_i^*e_k}=\frac{1}{3}\delta_{ik}$$

(而对这些量的求和将增加一个因子 $2\cdot 4\pi$). 结果,我们得到

$$\overline{\sigma}=\frac{8\pi}{9}\omega\omega'^3 c_{ikik}^{(21)}=\frac{8\pi}{9}\omega\omega'^3(3G_{21}^0+G_{21}^s+G_{21}^a). \qquad (60.8)$$

我们已经说过，散射的选择定则和任意二秩张量矩阵元的选择定则是一样的. 因为散射强度可以分解成三个独立部分，所以应该对每个部分的选择定则分别叙述.

对称散射的选择定则和电四极辐射的选择定则一样，因为后者也由不可约对称张量(四极矩张量)决定. 反对称散射的选择定则和磁偶极辐射的选择定则一样,因为两者都由轴矢量决定[反对称张量等价于(或对偶于)轴矢量]①. 但是这里有一个差别: 在辐射情形中给出电矩或磁矩平均值(不与辐射跃迁对应)的那些对角矩阵元，在散射情形中是非常重要的，这是因为它们与相干散射相关.

标量散射的选择定则和标量矩阵元的选择定则一样. 这意味着只有对称性相同的状态之间才能发生跃迁. 特别是，总角动量 $J$ 及其分量 $M$ 的值必须相同 [并且 $M$ 的对角矩阵元不依赖于 $M$,——参看第三卷(29.3)]. 因而,对非混合散射,态 1 和态 2 应该完全相同(不仅能量相同,而且$M$相同),而且非混合标量散射是完全相干的. 相反，由于标量散射中的所有状态在任何情况下都是自行组合的,因而在相干散射中总存在着标量部分.

与上面对散射截面的求平均相似，对于在空间自由取向的系统,极化张量也必须对角动量 $J_1$ 的方向求平均. 这个平均非常简单. 显然,我们有

$$\alpha_{ik}\equiv\overline{(c_{ik})}_{11}^{1}=\overline{(c^0)}_{11}^{1}\delta_{ik}.$$

① 当然,这里指的是与对称性相联系的选择定则,而不是辐射情形中与轴矢量的具体形式相联系的选择定则;磁矩矢量包含自旋部分，而在散射情形中所说的是纯轨道(坐标)量的矩阵元.

由于$\delta_{ik}$是唯一的二秩各向同性张量，散射张量的对称部分和反对称部分在平均时相消.

上面说过，标量的对角矩阵元不依赖于$M_1$，因而$(c^0)_{11}$上的求平均号可以略去（这个量对任何$M_1$值都能计算），因而极化度为

$$\alpha_{ik}=(c^0)_{11}\delta_{ik}. \tag{60.9}$$

由于同样的原因，决定相干散射标量部分的量$G_{11}^0$中的求平均号也可以略去:

$$G_{11}^0=\overline{|(c^0)_{11}|^2}=(c^0)_{11}^2 \tag{60.10}$$

[根据式(60.3)，略去了因子$2J_2+1$]. 这样一来，平均极化度和相干散射的标量部分之间有一简单关系：二者都由下面的量决定:

$$(c^0)_{11}=\frac{2}{3}\sum_n\frac{\omega_{n1}}{\omega_{n1}^2-\omega^2}|\boldsymbol{d}_{n1}|^2. \tag{60.11}$$

## 习　题

1. 求线偏振光散射时的角分布和消偏振度.

**解**　设$\theta$为散射方向$\boldsymbol{n}'$和入射光的偏振方向$\boldsymbol{e}$之间的夹角. 散射光包含两个独立分量：一个是在平面$\boldsymbol{n}'$, $\boldsymbol{e}$内的偏振分量(强度为$I_1$)，另一个是与此平面垂直的分量(强度为$I_2$)；消偏振度为$I_2/I_1$. 强度$I_1$和$I_2$由$\boldsymbol{e}'$取适当方向时的公式(60.7)决定.

在标量散射中，光在同一平面内完全偏振($I_1=0$)，强度的角分布为

$$I=\frac{3}{2}\sin^2\theta.$$

此后，$I=I_1+I_2$表达式的归一化是使按方向平均时为1. 在对称散射中

$$I=\frac{3}{20}(6+\sin^2\theta),\qquad \frac{I_2}{I_1}=\frac{3}{3+\sin^2\theta}.$$

在反对称散射中，

$$I=\frac{3}{4}(1+\cos^2\theta),\qquad \frac{I_2}{I_1}=\frac{1}{\cos^2\theta}.$$

2. 同上题，但是，是对自然光散射.

**解** 对入射的(非偏振)自然光应用公式(60.7)时，要作代换

$$e_i e_k^* \longrightarrow \frac{1}{2}(\delta_{ik} - n_i n_k),$$

这相当于在入射方向 $\boldsymbol{n}$ 为已知的条件下在偏振方向 $\boldsymbol{e}$ 上求平均. 散射光将是部分偏振的；从对称性考虑，显然，它的两个独立分量将是散射平面 $\boldsymbol{n}, \boldsymbol{n}'$ 内和与此平面垂直的方向上的线偏振光 (强度分别为 $I_\parallel$ 和 $I_\perp$) .散射角($\boldsymbol{n}$ 和 $\boldsymbol{n}'$ 间的夹角)用 $\theta$ 表示.

对于标量散射，

$$I = I_\perp + I_\parallel = \frac{3}{4}(1+\cos^2\theta), \qquad \frac{I_\parallel}{I_\perp} = \cos^2\theta.$$

对于对称散射，

$$I = \frac{3}{40}(13+\cos^2\theta), \qquad \frac{I_\parallel}{I_\perp} = \frac{6+\cos^2\theta}{7}.$$

对于反对称散射，

$$I = \frac{3}{8}(2+\sin^2\theta), \qquad \frac{I_\parallel}{I_\perp} = 1+\sin^2\theta.$$

3. 试确定圆偏振光散射中的反转系数 (“反转”方向上圆偏振分量的强度与“正常”方向上偏振分量的强度之比).

**解** 圆偏振入射光的角分布和消偏振度($I_\parallel/I_\perp$) 与自然光散射中一样.

设入射光的矢量 $\boldsymbol{e}$ 具有分量$(1, \mathrm{i}, 0)/\sqrt{2}$ (坐标系取法如下：$xz$ 平面为散射平面，$z$ 轴为 $\boldsymbol{n}$ 方向)，这时，散射光的“反转”和“正常”圆偏振分量的极化矢量分别为

$$\boldsymbol{e}' = \frac{1}{\sqrt{2}}(\cos\theta, -\mathrm{i}, -\sin\theta) \quad 和 \quad \boldsymbol{e}' = \frac{1}{\sqrt{2}}(\cos\theta, \mathrm{i}, -\sin\theta).$$

利用(60.7)计算强度，便求得三种散射的反转系数 $P$：

$$P^0 = \mathrm{tg}^4\frac{\theta}{2}, \quad P^s = \frac{13+\cos^2\theta+10\cos\theta}{13+\cos^2\theta-10\cos\theta}, \qquad P^a = \frac{1-\cos^4\dfrac{\theta}{2}}{1-\sin^4\dfrac{\theta}{2}}$$

($\theta$ 为散射角).

4. 计算基态氢原子对低频光子的散射截面.

**解** 低频光子的散射只能是弹性的. 由于氢原子基态的轨道角动量 $L=0$，忽略自旋-轨道耦合的选择定则，只允许标量散射. 原子的静态极化

(通常的单位)为:

$$\alpha=\frac{9}{2}\left(\frac{\hbar^2}{me^2}\right)^3$$

(参看第三卷 § 76 的习题 4). 代入式(60.8), 便得到所求的截面:

$$\sigma_t=54\pi\left(\frac{\omega}{c}\right)^4\left(\frac{\hbar^2}{me^2}\right)^6.$$

5. 计算氘核对 $\gamma$ 辐射弹性散射的截面(H. A. Bethe, R. Peierls, 1935).

**解** 氘核基态及其连续谱态(游离氘核)的波函数为

$$\psi_0=\sqrt{\frac{\kappa}{2\pi}}\frac{e^{-\kappa r}}{r},\quad \psi_p=e^{i\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{r}},\quad \kappa=\sqrt{MI}.$$

[参看(58.2)和(58.3)]. 偶极矩矩阵元 $\boldsymbol{d}_{p0}=-ie\boldsymbol{p}_{p0}/M\omega_{p0}$ 在 § 58 中计算过了:

$$\boldsymbol{d}_{p0}=-\frac{4\pi ie}{M\omega_{p0}}\sqrt{\frac{\kappa}{2\pi}}\frac{\boldsymbol{p}}{\kappa^2+p^2},$$

且频率 $\omega_{p0}=(p^2+\kappa^2)/M$. 极化张量为

$$\alpha_{ik}=\left\{\frac{2}{3}\int\frac{\omega_{p0}}{\omega_{p0}^2-\omega^2}|\boldsymbol{d}_{0p}|^2\frac{d^3p}{(2\pi)^3}-\frac{e^2}{2M\omega^2}\right\}\delta_{ik}.$$

第一项与氘核内部自由度的虚激发有关, 可以写成(60. 11)的形式. 第二项与波动场对氘核整体平移运动的作用有关. 由于这个运动是准经典的, 因而散射张量的相应部分由(59. 14)给出($m$ 为氘核质量 $2M$).

$\alpha_{ik}$ 的计算归结为求积分

$$J=\frac{1}{2}\int_{-\infty}^{\infty}\frac{z^4dz}{(z^2+1)^3[(z^2+1)^2-\gamma^2]},\quad z=\frac{p}{\kappa},\quad \gamma=\frac{M\omega}{\kappa^2}=\frac{\omega}{I}.$$

我们有

$$J=\frac{1}{8}\frac{d}{d\lambda}\left(\frac{1}{\lambda}\frac{dJ_0}{d\lambda}\right)\bigg|_{\lambda=1},\qquad J_0=\frac{1}{2}\int_{-\infty}^{\infty}\frac{z^4dz}{(z^2+\lambda^2)[(z^2+1)^2-\gamma^2]}.$$

当 $\gamma<1$ 时, 被积函数在复变量 $z$ 的上半平面内有极点 $i\lambda$, $i\sqrt{1+\gamma}$, $i\sqrt{1-\gamma}$; 由这些极点的留数可以算出积分 $J_0$. 结果为

$$J=\frac{\pi}{2}\left\{\frac{(1+\gamma)^{3/2}}{2\gamma^4}+\frac{(1-\gamma)^{3/2}}{2\gamma^4}-\left(\frac{3}{8\gamma^2}+\frac{1}{\gamma^4}\right)\right\}.$$

用 $\alpha_{ik}$ 表示总散射截面, 根据(60.8)和(60.10), 它等于(用普通单位):

$$\sigma=\frac{8\pi}{3}\left(\frac{e^2}{Mc^2}\right)^2\left|-1-\frac{4}{3\gamma^2}+\frac{2}{3\gamma^2}[(1+\gamma)^{3/2}+(1-\gamma)^{3/2}]\right|^2$$

当 $\gamma=\frac{\hbar\omega}{I}<1$ 时.

$\gamma>1$ （即在氘核的电离阈以上）时的散射振幅可借助解析延拓由 $\gamma<1$ 时的振幅得到，这个振幅有一正的虚部［按照(59.17)的绕行法则］：

$$\sigma=\frac{8\pi}{3}\left(\frac{e^2}{Mc^2}\right)^2\left|-1-\frac{4}{3\gamma^2}+\frac{2}{3\gamma^2}(\gamma+1)^{3/2}+i\frac{2}{3\gamma^2}(\gamma-1)^{3/2}\right|^2$$

当 $\gamma>1$ 时.

当 $\gamma\gg1$ 时，我们得到 $\sigma=\frac{8\pi}{3}\left(\frac{e^2}{Mc^2}\right)^2$. 理所应该，它与一个自由质子的非相对论散射一致.

辐射的角分布为

$$d\sigma=\sigma\frac{3}{4}(1+\cos^2\theta)\frac{do}{4\pi},$$

式中的 $\theta$ 为散射角. 根据(59.24)确定散射振幅后，我们有

$$\mathrm{Im}f(0)=\frac{2e^2}{3Mc^2}\,\frac{(\gamma-1)^{3/2}}{\gamma^2}\qquad 当\ \gamma>1\ 时.$$

按照光学定理(59.26)，这个量应该等于 $\omega\sigma_t/4\pi$，$\sigma_t$ 为光致蜕变的总截面(58.4). 由于弹性散射截面（$\sim e^4$）比离解截面［$\sim e^2$，参看(58,4)］级数高，因而 $\sigma_t$ 等于离解截面. 由于同样的原因，在这个近似中，当 $\gamma<1$（即在电离阈以下）时，散射振幅为实数.

## §61. 分子散射

分子散射的特殊性与分子的这样一些性质有关（这些性质也是建立分子光谱理论的基础）：根据分子的这些性质，可以分别处理原子核不动时的电子态和原子核在给定的电子有效场中的运动.

设入射光的频率 $\omega$ 小于第一电子激发能量 $\omega_e$，因而在散射过程中电子项不能被激发. 散射将是非混合散射，或是存在转动（或振动）能级激发的混合散射.

其次我们假设分子的电子基项是非简并的（且没有精细结构），换句话说，我们假设电子的总自旋和电子的总轨道角动量在分子轴线上的分量都等于零（对于对称陀螺型分子）. 对于双原子

分子，这意味着电子基项一定是 $^1\Sigma$. 我们知道，大多数分子的基态都能满足这些条件①.

最后我们假设频率 $\omega$ 比基项中核的（转动和振动）结构间隔大，而差 $\omega_e-\omega$ 与激发电子项中核的结构有类似关系. 所以，入射光的频率必定离共振相当远. 正是这些条件使我们在计算散射张量时从一开始就不考虑核的运动，而根据给定的核的组态来讨论问题.

在这样的问题中，散射张量就是极化张量 $\alpha_{ik}\equiv(c_{ik})_{11}$，并且原则上能够按照一般公式(59.17)计算；在式(59.17)中，求和是对所有激发电子项进行的. 这样得到的量 $\alpha_{ik}$ 是原子核组态坐标 $q$ 的函数（这些坐标是电子项的能量和波函数的参数）. 由于态是非简并的，张量 $\alpha_{ik}(q)$ 为实数，因而是对称的.

张量 $\alpha_{ik}(q)$ 是分子中已知原子核组态的电子极化度. 求解实际的散射问题时，还必须考虑初、终态中原子核的运动. 设 $\psi_{s_1}(q)$ 和 $\psi_{s_2}(q)$ 分别为初、终态中原子核的波函数（因而 $s_1$，$s_2$ 为振动和转动量子数组）. 所求的散射张量是 $\alpha_{ik}(q)$ 对这些函数的矩阵元：

$$\langle s_2|\alpha_{ik}|s_1\rangle=\int\psi^*_{s_2}(q)\alpha_{ik}(q)\psi_{s_1}(q)\mathrm{d}q. \tag{61.1}$$

因为张量 $\alpha_{ik}(q)$ 是对称的，所以张量(61.1)也是对称的（不论 $s_1$，$s_2$ 相同与否）. 这样，我们得出结论：在上述条件下，不论是在非混合散射中，还是在混合散射中，都没有反对称部分，散射将只包含标量部分和对称部分.

极化度的标量部分 $\alpha^0(q)$ 与分子的取向无关，而只依赖于分

---

① 然而，下面给出的结果也以一定的近似性适用于这样一种情况，即电子基项的简并是非零自旋引起的，自旋-轨道相互作用很小（因而由它们所引起的精细结构可以忽略）. 在这个近似中，具有不同自旋方向的态不能合并，在这个意义上讲，它们的行为好像是非简并的. 例如，具有基项 $^3\Sigma$ 的分子 $O_2$ 就属于这种类型.

子中原子的内部组态. 我们用 $v$ 代表分子的一组振动量子数，用 $r$ 代表一组转动量子数（磁量子数 $m$ 除外）. 那么矩阵元为

$$\langle v_2 r_2 m_2 | \alpha^0 | v_1 r_1 m_1 \rangle = \langle v_2 | \alpha^0 | v_1 \rangle \delta_{r_1 r_2} \delta_{m_1 m_2}. \tag{61.2}$$

对量子数 $r$，$m$ 的对角性是一切标量的普遍性质. (61.2) 的特点是：在这里矩阵元与这两个量子数完全无关. 因此，标量散射只对纯振动跃迁才有，而与转动态无关.

对称散射由张量 $\alpha^s_{ik}$ 的矩阵元决定. 它在固定坐标系 $xyz$ 中的分量可以通过随分子一起运动的坐标系 $\xi\eta\zeta$ 中的分量 $\overline{\alpha^s_{i'k'}}$ 表达：

$$\alpha^s_{ik} = \sum_{i'k'} \overline{\alpha^s_{i'k'}} D_{i'i} D_{k'k}, \tag{61.3}$$

式中 $D_{i'i}$ 为新坐标轴对旧坐标轴的方向余弦. 量 $\overline{\alpha^s_{i'k'}}$ 与分子的取向无关，而 $D_{i'i}$ 与分子的内坐标无关. 因此

$$\langle v_2 r_2 m_2 | \alpha^s_{ik} | v_1 r_1 m_1 \rangle = \sum_{i'k'} \langle v_2 | \overline{\alpha^s_{i'k'}} | v_1 \rangle \langle r_2 m_2 | D_{i'i} D_{k'k} | r_1 m_1 \rangle.$$

不难证明，这些量的模平方对 $r_2 m_2$，$ik$ 求和等于①

$$\sum_{m_2 r_2} \sum_{ik} |\langle v_2 r_2 m_2 | \alpha^s_{ik} | v_1 r_1 m_1 \rangle|^2 = \sum_{i'k'} |\langle v_2 | \overline{\alpha^s_{i'k'}} | v_1 \rangle|^2. \tag{61.4}$$

这意味着，对于从已知振动-转动能级 $v_1 r_1$ 到振动态 $v_2$ 的所有转动能级的跃迁，总散射强度与 $r_1$ 无关.

对于对称陀螺型分子来说，还可进一步求出散射强度与每一

---

① 对求和作变换时，我们用了等式

$$\sum_{ik} \sum_{r_2 m_2} \langle r_1 m_1 | D_{li} D_{kg} | r_2 m_2 \rangle \langle r_2 m_2 | D_{il'} D_{kg'} | r_1 m_1 \rangle$$
$$= \langle r_1 m_1 | \sum_{ik} D_{li} D_{kg} D_{il'} D_{kg'} | r_1 m_1 \rangle = \langle r_1 m_1 | \delta_{ll'} \delta_{gg'} | r_1 m_1 \rangle = \delta_{ll'} \delta_{gg'},$$

此式表示矩阵 $D_{ik}$ 是幺正的.

个跃迁 $v_1r_1 \to v_2r_2$ 的转动量子数之间的关系. 在这种情形下, 量子数 $r$ 是角动量 $J$ 及其在分子轴线上的分量 $k$. 我们将 $\alpha^s_{ik}$ 的笛卡儿分量用相应的二秩球张量代替, 其分量用 $\alpha_\lambda$ 表示($\lambda=0, \pm1, \pm2$). 按照第三卷(110.7), 这个量的矩阵元的模平方为

$$|\langle v_2J_2k_2m_2|\alpha_\lambda|v_1J_1k_1m_1\rangle|^2$$
$$=(2J_1+1)(2J_2+1)\begin{pmatrix} J_2 & 2 & J_1 \\ -k_2 & \lambda' & k_1 \end{pmatrix}^2\begin{pmatrix} J_2 & 2 & J_1 \\ -m_2 & \lambda & m_1 \end{pmatrix}^2$$
$$\times|\langle v_2|\bar{\alpha}_{\lambda'}|v_1\rangle|^2,$$

式中的 $\alpha_{\lambda'}(q)$ 是对固定在分子上的坐标轴的球极化张量, 且 $\lambda'=k_2-k_1$. 对 $m_2$ 和 $\lambda=m_2-m_1$ 求和($m$ 固定), 我们得到[比较第三卷(110.8)]:

$$\sum_{m_2\lambda}|\langle v_2J_2k_2m_2|\alpha_\lambda|v_1J_1k_1m_1\rangle|^2$$
$$=(2J_2+1)\begin{pmatrix} J_2 & 2 & J_1 \\ -k_2 & \lambda' & k_1 \end{pmatrix}^2|\langle v_2|\bar{\alpha}_{\lambda'}|v_1\rangle|^2. \qquad (61.5)$$

这个量决定振动-转动跃迁 $v_1J_1k_1 \to v_2J_2k_2$ 的散射强度. 由于矩阵元 $\langle v_2|\bar{\alpha}_{\lambda'}|v_1\rangle$ 一般不依赖于分子的转动, 因而, 式(61.5)也确定了强度对 $J_1$, $J_2$ 和 $k_1, k_2$ 的依赖关系. 我们看到, (61.5)的右端只含极化张量的一个球分量.

如果将等式(61.5)对 $J_2$ 和 $k_2$ 求和, 我们得到①

$$\sum_\lambda\sum_{J_2k_2m_2}|\langle v_2J_2k_2m_2|\alpha_\lambda|v_1J_1k_1m_1\rangle|^2=\sum_{\lambda'}|\langle v_2|\bar{\alpha}_{\lambda'}|v_1\rangle|^2,$$

于是, 我们回到了求和法则(61.4).

对称陀螺的一种特殊情形是转子——一种线状分子(例如双

---

① 在给定 $k_1$ 和 $\lambda'$(因而 $k_2=k_1+\lambda'$ 给定)的条件下对 $J_2$ 求和, 我们有

$$\sum_{J_2}(2J_2+1)\begin{pmatrix} J_2 & 2 & J_1 \\ -k_2 & \lambda' & k_1 \end{pmatrix}^2=1$$

[参看第三卷(106.13)]. 然后在给定 $k_1$ 的条件下对 $k_2$(或 $\lambda'=k_2-k_1$)求和.

原子分子）．角动量在这种分子轴线上的分量等于零（在电子轨道角动量为零的非简并电子态中）①．因而这时应设(61．5)中$k_1=k_2=0$.

最后我们来研究振动混合散射中的选择定则问题以及分子振动光谱（发射谱或吸收谱）中的同类问题②．

对于散射，问题只在于找出张量$\alpha_{ik}(q)$对振动波函数$\psi_v(q)$的矩阵元不为零的条件．这时，标量$\alpha^0$（对于标量散射）和不可约对称张量$\alpha^s_{ik}$（对于对称散射）应分别考虑．在发射（或吸收）中起相应作用的是矢量$\boldsymbol{d}(q)$的矩阵元，$\boldsymbol{d}(q)$为原子核位置给定时分子偶极矩对电子态的平均值（对于双原子分子，这一点在§54中已经讲过了）．

多原子分子的振动可以按照对称类型分类，即按照相应点群的不可约表示$D_a$分类，$a$为表示的编号（参看第三卷§100）．这些表示也可以用来确定分子振动态波函数的对称性（参看第三卷§101）．第一振动态（量子数$v_a=1$）波函数的对称性与振动模式的对称性$D_a$相同．较高态($v_a>1$)的对称性的表示为$[D_a^{v_a}]$，这是表示$D_a$自乘$v_a$次的对称积．最后，不同振动$a$和$b$同时被激发的态的对称性由直积$[D_a^{v_a}]\times[D_a^{v_a}]$给出③．各种量（标量，矢量，张量）按不同对称类型的选择定则已在第三卷§97中讲述过了．

由分子的对称性质得到的选择定则是很严格的．此外还有一些建立在如下假设基础上的近似定则：振动是谐振动，函数$\alpha_{ik}(q)$或$\boldsymbol{d}(q)$可以展成振动坐标$q$的幂级数．这些近似定则来源于谐振子的已知选择定则；按照谐振子的选择定则，只有对振动量子数改

---

① 这里我们未考虑由于分子的振动与转动之间的相互作用而引起的效应（参看第三卷，§104）．

② 这些光谱在红外区，一般出现在吸收谱中．

③ 自然，振动波函数的对称性质和振动势能的具体形式无关，特别是与第三卷§101关于振动为谐振动的假设无关．

变 $\Delta v=\pm 1$ 的跃迁，谐振子坐标 $q$ 的矩阵元才不等于零.

## §62. 谱线的自然宽度

迄今为止，我们在研究光的辐射和散射时，把系统(譬如说，原子）的所有能级都看成是严格分立的．但事实上激发能级由于发射而有一定的蜕变几率，所以其寿命是有限的．按照量子力学的一般原理，就会得出这样的结论：能级是准分立的，具有某种有限(当然是很小)的宽度（参看第三卷 § 134)，可以写成 $E-i\Gamma/2$ 的形式，$\Gamma(\Gamma=\Gamma/\hbar)$ 为单位时间内该状态所有可能的“蜕变”过程的总几率.

我们来研究这个情况是如何影响辐射过程的(V. Weisskopf, E. Wigner, 1930)．很显然，由于能级存在一定的宽度，因而发出的光不是严格单色的，频率有一定展宽 $\Delta\omega\sim\Gamma(=\Gamma/\hbar)$．这时，由于辐射系统初态的寿命是有限的，所以，自然提出寻求发射给定频率的光子的总几率而不是单位时间内的发射几率的问题，首先，我们对原子从某个激发能级

$$E_1-\frac{i}{2}\Gamma_1$$

到基态能级 $E_2$ 的跃迁计算这个总几率．基态能级 $E_2$ 的寿命为无限大，因而是严格分立的.

设 $\Psi$ 为原子和光子场的波函数，$\hat{H}=\hat{H}^{(0)}+\hat{V}$ 为这个系统的哈密顿算符，而 $\hat{V}$ 为原子和光子场的相互作用算符．我们来求薛定谔方程

$$i\frac{\partial\Psi}{\partial t}=(\hat{H}^0+\hat{V})\Psi \tag{62.1}$$

的解．将解写成系统的非微扰态波函数的展开式：

$$\Psi=\sum_\nu a_\nu(t)\Psi_\nu^{(0)}=\sum_\nu a_\nu(t)e^{-i\varepsilon_\nu t}\psi_\nu^{(0)}. \tag{62.2}$$

对于系数 $a_\nu(t)$，我们得到方程系

$$i\frac{\partial a_\nu}{\partial t}=\sum_{\nu'}\langle\nu|V|\nu'\rangle a_{\nu'}\exp\{i(\mathscr{E}_\nu-\mathscr{E}_{\nu'})t\}. \qquad (62.3)$$

设 $|\nu\rangle$ 为能量 $\mathscr{E}_\nu=E_2+\omega$ 的态，在这个态中，原子处于基态能级 $E_2$，且有一个确定频率 $\omega$ 的光量子；这个态我们用符号 $|\omega 2\rangle$ 表示. 在初始时刻，系统处于态 $|1\rangle$，该态是原子被激发到能级 $E_1$，且不存在光子. 换句话说，在 $t=0$ 时我们应该有

$$a_1=1, \qquad a_{\nu'}=0 \qquad 对于\ |\nu'\rangle\neq|1\rangle. \qquad (62.4)$$

方程（62.3）在这个初始条件下的解（波函数适当归一化）给出 $t$ 时刻原子产生跃迁 1→2 并发射一个频率间隔为 $d\omega$ 的光子的几率：

$$|a_{\omega 2}(t)|^2 d\omega.$$

我们感兴趣的是 $t\to\infty$ 时的极限几率

$$dw=|a_{\omega 2}(\infty)|^2 d\omega. \qquad (62.5)$$

为了使问题更为明确，应该回顾一下：在一级近似中求跃迁 1→2 在单位时间内的普通发射几率时(不考虑能级宽度)，必须把方程(62.3)右端的所有 $a_{\nu'}(t)$代之以(62.4)的值，然后将这样得到的解对大的 $t$ 值进行检验(比较第三卷 § 42)．现在我们可以更为精确地阐明这个方法：它所涉及的时间比激发能级的寿命短；所说的大的 $t$ 是指比时间 $1/(E_1-E_2)$大，但仍然比 $1/\Gamma_1$ 小.

在现在的情形下，所考虑的时间可以和 $1/\Gamma_1$ 相比拟，函数 $a_1(t)$按如下规律随时间衰减：

$$a_1(t)=e^{-\Gamma_1 t/2}. \qquad (62.6)$$

但是，对于原子发射产生的态 $|\nu'\rangle$，函数 $a_{\nu'}(t)$ 随时间递增. 如果从给定能级 $E_1$ 不但能跃迁到能级 $E_2$，还可以跃迁到原子的各个不同能级，那么将有许多递增函数 $a_{\nu'}(t)$，其中每一个都对应着一个态；在这个态中，原子处在一定的能级上，且有一个适当能量的

光子．然而，在方程(62.3)的右端仍旧只保留了一项($|\nu'\rangle=1$的项)．实际上，非零矩阵元只存在于这样的跃迁中：其中具有相同能量的光子数目改变1．因此，若各个态包含一个能量相异的光子，矩阵元必定等于零．

这样，对于$a_{\omega 2}(t)$，我们有方程

$$
\begin{aligned}
\mathrm{i}\frac{\mathrm{d}a_{\omega 2}}{\mathrm{d}t} &= \langle\omega 2|V|1\rangle \mathrm{e}^{\mathrm{i}(E_2+\omega-E_1)t}a_1 \\
&= \langle\omega 2|V|1\rangle \exp\left\{\mathrm{i}(\omega-\omega_{12})t-\frac{\Gamma_1}{2}t\right\} \qquad (62.7)
\end{aligned}
$$

(式中$\omega_{12}=E_1-E_2$)．在$a_{\omega 2}(0)=0$的条件下进行积分，我们求得

$$
a_{\omega 2}=\langle\omega 2|V|1\rangle\frac{1-\exp\{\mathrm{i}(\omega-\omega_{12})t-\Gamma_1 t/2\}}{\omega-\omega_{12}+\mathrm{i}\Gamma_1/2}. \qquad (62.8)
$$

因此几率$\mathrm{d}w$(62.5)为：

$$
\mathrm{d}w=|\langle\omega 2|V|1\rangle|^2\frac{\mathrm{d}\omega}{(\omega-\omega_{12})^2+\Gamma_1^2/4}.
$$

由于宽度$\Gamma_1\ll\omega_{12}$，所以在因子$|\langle\omega 2|V|1\rangle|^2$中可以假设$\omega=\omega_{12}$．这时，量$2\pi|\langle\omega 2|V|1\rangle|^2$为发射光子的普通几率（单位时间内）．所发射的光子具有频率$\omega_{12}$以及除频率外的其他特征量，如运动方向和极化．为了简化符号，迄今为止我们没有提起这些量．我们看到，几率对这些特征量的依赖关系完全由因子$|\langle\omega 2|V|1\rangle|^2$决定．所以，考虑能级宽度不会改变极化性质和辐射的角分布．

对光子的极化和运动方向求和

$$
\Gamma_{1\to 2}=2\pi\sum|\langle\omega 2|V|1\rangle|^2 \qquad (62.9)
$$

得到通常的总发射几率，也是能级$E_1$中由跃迁$1\to 2$引起的宽度部分(能级分宽度)，它和总宽度$\Gamma_1$不同．总宽度$\Gamma_1$产生于该准

稳态所有可能的"蜕变"方式的总贡献①.

对几率 $dw$ 进行同样的求和，我们得到发射光频率分布的最后表达式

$$dw = w_t \frac{\Gamma_1}{2\pi} \frac{d\omega}{(\omega_{12}-\omega)^2+\Gamma_1^2/4}, \qquad (62.10)$$

式中 $w_t = \Gamma_{1\to 2}/\Gamma_1$ 为跃迁 1→2 的总相对几率. 这是一种色散型分布. 公式(62.10)所描写的谱线形状是孤立不动的原子所固有的，叫做自然形状②.

现在设原子的能级 $E_2$ 也是激发能级，具有有限宽度 $\Gamma_2$. 为简单起见，我们假设这个宽度是由于原子跃迁到基态 $E_0$ 并发射一个光子而产生的[最后结果(62.12)与这个假设无关]. 这时态1的蜕变过程可以看成在 §59 中所研究过的两个光子的发射过程. 这个过程的矩阵元(暂不考虑态 2 寿命的有限性)由如下公式给出:

$$\langle \omega\omega' 0|V^{(2)}|1\rangle = \frac{\langle \omega\omega' 0|V|\omega 2\rangle \langle \omega 2|V|1\rangle}{E_0-E_2+\omega'+i0} \qquad (62.11)$$

[公式(59.2)中的态 2 变为态0，而对 $n$ 的求和中只剩下与态 2 的原子所对应的项，由于 $\omega'$ 接近 $E_2-E_0$ 时的共振，这一项很大]. 现在如果考虑到态 2 的寿命有限，只需在(62.11)中进行代换 $E_2\to E_2-i\Gamma_2/2$，因而

$$\langle \omega\omega' 0|V^{(2)}|1\rangle = \frac{\langle \omega\omega' 0|V|\omega 2\rangle \langle \omega 2|V|1\rangle}{E_0-E_2+\omega'+i\Gamma_2/2}.$$

把矩阵元的这个值代入 $a_{\omega\omega' 2}(t)$ 的方程[该方程与(62.7)的差别只

---

① 当然，公式(62.6)，(62.9)可以通过对 $a_1(t)$ 求解类似于(62.7)的方程得到.

我们看到，跃迁到连续谱的态(产生一有限的能级宽度)不一定有光子发射. 强激发($x$ 射线激发)能级在衰变时可以发射一个电子且形成一个处于基态的正离子(俄歇效应).

② 它不同于一原子与其它原子相互作用所引起的增宽(碰撞增宽)，或者由辐射源中原子的不同速度所引起的增宽(多普勒增宽).

是下标不同]，经过与(62.8)完全相同的推导，我们得到：

$$a_{\omega\omega'0}(\infty)$$

$$=\frac{\langle\omega\omega'0|V|\omega2\rangle\langle\omega2|V|1\rangle}{(\omega'-\omega_{20}+\mathrm{i}\Gamma_2/2)(\omega+\omega'-\omega_{10}+\mathrm{i}\Gamma_1/2)}.$$

发射 $\omega$ 和 $\omega'$ 光子的几率等于

$$\mathrm{d}w=|a_{\omega\omega'0}(\infty)|^2\mathrm{d}\omega\mathrm{d}\omega'$$

$$=\frac{\Gamma_{1\to2}}{2\pi}\frac{\Gamma_{2\to0}}{2\pi}\frac{\mathrm{d}\omega\mathrm{d}\omega'}{[(\omega'-\omega_{20})^2+\Gamma_2^2/4][(\omega+\omega'-\omega_{10})^2+\Gamma_1^2/4]}.\tag{62.12}$$

此式当 $\omega'\approx\omega_{20}$ 和 $\omega\approx\omega_{12}$ 时具有尖锐的峰值，这也是理应如此.

与跃迁 1→2 对应的谱线形状可以由式 (62.12) 对 $\mathrm{d}\omega'$ 积分得到（积分区域可以扩展到从 $-\infty$ 到 $+\infty$）. 如果利用复变量 $\omega'$ 在复平面上半部的无限大半圆封闭积分路径，则积分的计算非常简单，其结果由被积函数在极点

$$\omega'=\omega_{20}+\mathrm{i}\Gamma_2/2 \quad 和 \quad \omega'=\omega_{10}-\omega+\mathrm{i}\Gamma_1/2$$

上的留数之和决定，最后我们得到

$$\mathrm{d}w=w_n\frac{\Gamma_1+\Gamma_2}{2\pi}\frac{\mathrm{d}\omega}{(\omega-\omega_{12})^2+(\Gamma_1+\Gamma_2)^2/4},\tag{62.13}$$

式中 $w_n=\Gamma_{1\to2}\Gamma_{2\to0}/\Gamma_1\Gamma_2$ 为二重跃迁 1→2→0 的总几率①.

谱线(62.13) 的形状与 (62.10) 的区别仅仅在于代换 $\Gamma_1\to\Gamma_1+\Gamma_2$——谱线宽度等于初态和终态宽度之和.

一般来说，谱线宽度不等于跃迁 1→2 本身的几率 $\Gamma_{1\to2}$，就是说，并不与谱线强度成正比（像在经典理论中那样）. 由于 $\Gamma_1+\Gamma_2>\Gamma_{1\to2}$，因而谱线宽度比较大而强度比较小.

---

① 在更复杂的情形下，$w_n$ 为从跃迁 1→2 开始并在能级 0 上结束的所有级联跃迁的总几率.

## § 63. 共振荧光

在光的散射问题中，当入射光的频率 $\omega$ 接近一个"中间"频率 $\omega_{n1}$ 或 $\omega_{n2}$ 时，考虑能级的有限宽度是很重要的，这就是所谓的共振荧光(V. Weisskopf, 1931).

我们来研究系统(例如原子)处于基态时的非混合散射，因而初、终态能级为同一能级且是严格分立的. 设光的频率接近某个频率 $\omega_{n1}$，这里 $n$ 是被激发的能级，所以是准分立的.

解决这个问题可以用上节所阐述的方法，但是在这里不需要那样做，因为它与准分立能级的非相对论共振散射问题完全相似，请读者参看第三卷 §134. 按照在那里得到的结果，散射振幅必须包含一个极因子

$$\left[\omega-\left(E_n-\mathrm{i}\frac{\Gamma_n}{2}-E_1\right)\right]^{-1}.$$

另一方面，当 $|\omega-\omega_{n1}|\gg\Gamma_n$ 时，公式应该过渡到非共振公式(59.5). 由此可见，所求的散射截面可由式(59.5)作简单代换 $E_n\to E_n-\mathrm{i}\Gamma_n/2$ 得到，而对 $n$ 的求和仅限于共振项:

$$\mathrm{d}\sigma=\frac{\left|\sum_{M_n}(\boldsymbol{d}_{2n}\cdot\boldsymbol{e}'^*)(\boldsymbol{d}_{n1}\cdot\boldsymbol{e})\right|^2}{(\omega_{n1}-\omega)^2+\Gamma_n^2/4}\omega^4 do' \qquad (63.1)$$

求和是对所有与共振能级 $E_n$ 对应的状态(具有不同的角动量分量值 $M_n$)进行. 态 1 和态 2 属于同一"基态"能级，但可由值 $M_1$ 和 $M_2$ 相区别.

截面 (63.1) 在 $\omega=\omega_{n1}$ 时有极大值，其数量级为 $\sigma_{\max}\sim\omega^4d^4/\Gamma_n^2$. 由于自发跃迁 $n\to1$ 的几率及宽度 $\Gamma_n\sim\omega^3d^2$，所以此值为

$$\sigma_{\max}\sim\frac{1}{\omega^2}\sim\lambda^2, \qquad (63.2)$$

与共振区域以外的典型值 $\sim r_e^2$ 比较，此值与光波长的平方同数量

级，且与精细结构常数无关.

我们着重指出，由于散射前后原子都处在严格的分立能级（其态能级）上，因而初级光子和次级光子的频率是完全相同的.所以，如果入射光是单色的，那么散射光也是单色的. 如果入射光具有谱强度分布 $I(\omega)$，而且函数 $I(\omega)$在宽度 $\Gamma_n$ 上变化很小，那么散射光强度将正比于

$$\frac{I(\omega_{n1})\mathrm{d}\omega}{(\omega-\omega_{n1})^2+\Gamma_n^2/4}. \tag{63.3}$$

这样一来，散射线的形状与能级 $E_n$ 的自发发射谱线的自然形状完全一样.

截面(63.1)所对应的散射张量为

$$(c_{ik})_{21}=\frac{\sum\limits_{M_n}(d_i)_{2n}(d_k)_{n1}}{\omega_{n1}-\omega-\mathrm{i}\Gamma_n/2}. \tag{63.4}$$

特别是，极化张量

$$\alpha_{ik}=(c_{ik})_{11}=\frac{\sum\limits_{M_n}(d_i)_{1n}(d_k)_{n1}}{\omega_{n1}-\omega-\mathrm{i}\Gamma_n/2}. \tag{63.5}$$

可以立即看到，中间激发态能级上增加的虚部破坏了极化张量的厄密性（甚至当频率低于电离阈时），而虚部的出现直接与光的吸收相联系.

原子吸收一个光子后，迟早要重新回到基态并发射一个或数个光子. 所以，从这个观点来看，吸收截面不过是所有可能的散射过程的总截面 $\sigma_t$①. 另一方面，按照光学定理(59.25)，这个截面可由极化张量的反厄密部分表示.

由(63.5)算出张量 $\alpha_{ik}$，将它代入(59.25)，我们求得吸收一

① 必须强调，这里所说的是系统处于稳定基态中的吸收. 对于激发态而言，这个问题的说法将是不同的，这是因实验时间的有限性所致.

个频率为$\omega$(接近$\omega_{n1}$)的光子的截面公式:

$$\sigma^{吸收}=4\pi^2\sum_{M_n}|\boldsymbol{d}_{n1}\cdot\boldsymbol{e}|^2\omega\frac{\Gamma_n/2}{\pi[(\omega-\omega_{n1})^2+\Gamma_n^2/4]}. \quad (63.6)$$

在$\Gamma_n\to0$的极限情形中，这个公式中的最后一个因子趋于$\delta$函数$\delta(\omega-\omega_{n1})$. 这与以下事实相一致：在这种情况下，只能吸收一个具有特定频率的光子. 设入射在原子上的光具有谱的和角的能流密度$I_{\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{e}}$[比较式(44.7)],这时光子数通量密度为$\frac{I_{\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{e}}}{\omega}\mathrm{d}\omega\mathrm{d}o$, 而吸收几率为

$$\mathrm{d}w^{吸收}=\sigma^{吸收}\frac{I_{\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{e}}}{\omega}\mathrm{d}\omega\mathrm{d}o. \quad (63.7)$$

如果函数$I_{\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{e}}(\omega)$在宽度$\Gamma_n$上变化很小，那么，对频率积分后我们得到

$$\mathrm{d}w^{吸收}=4\pi^2\sum_{M_n}|\boldsymbol{d}_{n1}\boldsymbol{e}|^2 I_{\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{e}}(\omega_{n1})\mathrm{d}o.$$

另一方面，按照式(45.5),

$$\mathrm{d}w^{自发}=\frac{\omega^3}{2\pi}\sum_{M_n}|\boldsymbol{d}_{1n}\cdot\boldsymbol{e}^*|^2\mathrm{d}o=\frac{\omega^3}{2\pi}\sum_{M_n}|\boldsymbol{d}_{n1}\boldsymbol{e}|^2\mathrm{d}o$$

是自发发射一个频率为$\omega_{n1}$的光子的几率，于是我们回到公式(44.9).

# 第七章 散射矩阵

## §64. 散射振幅

碰撞问题的一般提法是：已知系统的初态（一组自由粒子），求各种可能的终态（另一组自由粒子）的几率．如果用符号$|i\rangle$表示初态，碰撞结果可以写成叠加

$$\sum_f |f\rangle\langle f|S|i\rangle, \tag{64.1}$$

式中的求和是对各种可能的终态$|f\rangle$进行的．这个展开式的系数$\langle f|S|i\rangle$（简写为$S_{fi}$）组成**散射矩阵**或**S-矩阵**①，它的平方$|S_{fi}|^2$就是跃迁到某个确定状态$|f\rangle$的几率．

只要粒子之间没有相互作用，系统的态就不会改变，这种情况将相当于单位$S$-矩阵（无散射情况）．在任何情况下，总可以方便地把单位矩阵分离出来，把散射矩阵写成如下形式：

$$S_{fi}=\delta_{fi}+i(2\pi)^4\delta^{(4)}(P_f-P_i)T_{fi}, \tag{64.2}$$

式中的$T_{fi}$是另一个矩阵．在第二项中分出了一个表达四维动量守恒定律的四维$\delta$函数（$P_i$和$P_f$为初态和终态中所有粒子的四维动量之和），而其余因子是为了今后方便引入的．在非对角矩阵元中，式(64.2)中的第一项不出现，因而对于跃迁$i\to f$，$S$矩阵元和$T$矩阵元之间有如下关系：

$$S_{fi}=i(2\pi)^4\delta^{(4)}(P_f-P_i)T_{fi}. \tag{64.3}$$

分出$\delta$函数后所剩下的矩阵元$T_{fi}$叫做**散射振幅**．

---

① 来自英文 Scattering 或德文 Streuung.

当取模 $|S_{fi}|$ 的平方时出现 $\delta$ 函数的平方，它应该这样来理解：$\delta$ 函数来自积分

$$\delta^{(4)}(P_f-P_i)=\frac{1}{(2\pi)^4}\int e^{i(P_f-P_i)x}d^4x, \tag{64.4}$$

如果对 $P_f=P_i$ 计算另一个同样的积分(由于已经有一个 $\delta$ 函数)，并且积分遍及某个很大、然而有限的体积 $V$ 和时间间隔 $t$，我们将得到 $Vt/(2\pi)^4$①. 因此，可以写出

$$|S_{fi}|^2=(2\pi)^4\delta^{(4)}(P_f-P_i)|T_{fi}|^2Vt;$$

此式除以 $t$，就得到单位时间内的跃迁几率

$$w_{i\to f}=(2\pi)^4\delta^{(4)}(P_f-P_i)|T_{fi}|^2V. \tag{64.5}$$

每个(初态的和终态的)自由粒子都用自己的波函数——振幅为 $u$ 的平面波描述(对于电子，就是双旋量；对于光子，就是四维矢量；等等). 散射振幅 $T_{fi}$ 的结构形式为

$$T_{fi}=u_1'^*u_2'^*\cdots Qu_1u_2\cdots, \tag{64.6}$$

左边为终态粒子波函数的振幅，右边为初态粒子波函数的振幅，$Q$ 为某个矩阵(与所有粒子波振幅的分量指标相关).

最重要的情形是初态只有一个粒子或两个粒子：前者为衰变，后者为两个粒子的碰撞.

首先我们研究一个粒子衰变成任意个动量为 $p'_a$(在动量空间元 $\Pi d^3p'_a$ 中)的其它粒子的情形 (指标 $a$ 为终态粒子编号，因而 $\Sigma p'_a=P_f$). 在这个空间元 (且在归一化体积 $V$②) 中的状态数为

$$\prod_a\frac{Vd^3p'_a}{(2\pi)^3},$$

① 这一点可用另一种方法证明：首先在有限范围内计算(64.4)中每一个坐标的积分，然后利用第三卷的公式(42.4)，取其趋于无限大时的极限：

$$\lim_{\xi\to\infty}\frac{\sin^2\alpha\xi}{\xi\alpha^2}=\pi\delta(\alpha).$$

② 为使计算更直观起见，在本节中我们不假设归一化体积等于1.

表达式(64.5)乘以此量得

$$dw=(2\pi)^4\delta^{(4)}(P_f-P_i)|T_{fi}|^2V\prod_a\frac{Vd^3p'_a}{(2\pi)^3}. \qquad (64.7)$$

计算矩阵元时所用的所有粒子的波函数，都应该归一化为“体积$V$中有一个粒子”．对于电子，这就是平面波(23.1)；对于自旋为1的粒子，这就是式(14.12)；对于光子为式(4.3)．所有这些函数都含有因子 $1/\sqrt{2\varepsilon V}$，$\varepsilon$为一个粒子的能量．但是，为今后计算方便，在粒子的波函数中都不写出这个因子，而将它包含在几率的表达式中．这样一来，电子平面波为

$$\psi=ue^{-ipx}, \quad \bar{u}u=2m, \qquad (64.8)$$

而光子波为

$$A=\sqrt{4\pi}ee^{-ikx}, \quad ee^*=-1, \quad ek=0. \qquad (64.9)$$

用这样的函数计算的散射振幅用 $M_{fi}$ 表示(以区别 $T_{fi}$)．显然，

$$T_{fi}=\frac{M_{fi}}{(2\varepsilon_1V\cdots2\varepsilon'_1V\cdots)^{1/2}}; \qquad (64.10)$$

对每一个初态或终态粒子，分母中都有一个因子$\sqrt{2\varepsilon V}$．特别是，我们可以把式(64.7)的衰变几率写成

$$dw=(2\pi)^4\delta^{(4)}(p_f-p_i)|M_{fi}|^2\frac{1}{2\varepsilon}\prod_a\frac{d^3p'_a}{(2\pi)^32\varepsilon'_a}, \qquad (64.11)$$

式中$\varepsilon$为衰变粒子的能量；正如我们所期待的，归一化体积从这个公式中消去了①.

若衰变产生两个粒子(动量为 $\boldsymbol{p}'_1$，$\boldsymbol{p}'_2$ 而能量为 $\varepsilon'_1,\varepsilon'_2$)，可以消去$\delta$函数以使公式(64.11)有更为确定的形式．在衰变粒子的静止参考系中，$\boldsymbol{p}'_1=-\boldsymbol{p}'_2\equiv\boldsymbol{p}'$，$\varepsilon'_1+\varepsilon'_2=m$．我们有

---

① 如果终态粒子中有$N$个是全同的，为求出总几率，对它们的动量积分时应该引入因子 $1/N!$，这个因子考虑了以粒子的交换相区别的态的同一性.

$$dw=\frac{1}{(2\pi)^2}|M_{fi}|^2\frac{1}{2m}\frac{1}{4\varepsilon_1'\varepsilon_2'}\delta(\boldsymbol{p}_1'+\boldsymbol{p}_2')\delta(\varepsilon_1'+\varepsilon_2'-m)d^3p_1'd^3p_2'.$$

第一个 $\delta$ 函数在对 $d^3p_2'$ 积分时消去，而微分 $d^3p_1'$ 可以改写成

$$d^3p'=\boldsymbol{p}'^2d|\boldsymbol{p}'|do=|\boldsymbol{p}'|do\frac{\varepsilon_1'\varepsilon_2'd(\varepsilon_1'+\varepsilon_2')}{\varepsilon_1'+\varepsilon_2'} \quad (64.12)$$

(这个写法的正确性很容易从 $\varepsilon_1'^2-m_1'^2=\varepsilon_2'^2-m_2'^2=\boldsymbol{p}'^2$ 看出). 对 $d(\varepsilon_1'+\varepsilon_2')$ 积分消去第二个 $\delta$ 函数，我们得到

$$dw=\frac{1}{32\pi^2m^2}|M_{fi}|^2|\boldsymbol{p}'|do'. \quad (64.13)$$

现在我们来研究动量为 $\boldsymbol{p}_1$ 和 $\boldsymbol{p}_2$，能量为 $\varepsilon_1$ 和 $\varepsilon_2$ 的两个粒子的碰撞. 碰撞结果，它们变成动量为 $\boldsymbol{p}_a'$ 的一组任意数目的粒子. 式(64.11)现在可以写成

$$dw=(2\pi)^4\delta^{(4)}(P_f-P_i)|M_{fi}|^2\frac{1}{4\varepsilon_1\varepsilon_2V}\prod_a\frac{d^3p_a'}{(2\pi)^3 2\varepsilon_a'}.$$

然而，在这种情形下我们所感兴趣的量不是几率，而是截面 $d\sigma$. 对洛伦兹变换不变的截面可以由 $dw$ 除以量

$$j=\frac{I}{V\varepsilon_1\varepsilon_2} \quad (64.14)$$

得到，式中的 $I$ 代表四维标量

$$I=\sqrt{(p_1p_2)^2-m_1^2m_2^2} \quad (64.15)$$

(参看第二卷 § 12)①. 在质心坐标系中($\boldsymbol{p}_1=-\boldsymbol{p}_2\equiv\boldsymbol{p}$),

$$I=|\boldsymbol{p}|(\varepsilon_1+\varepsilon_2), \quad (64.16)$$

因而

$$j=\frac{|\boldsymbol{p}|}{V}\left(\frac{1}{\varepsilon_1}+\frac{1}{\varepsilon_2}\right)=\frac{v_1+v_2}{V}, \quad (64.17)$$

---

① 为今后引用方便，$I$ 也可以写成另一种形式:

$$I^2=\frac{1}{4}[s-(m_1+m_2)^2][s-(m_1-m_2)^2], \quad (64.15a)$$

式中 $s=(p_1+p_2)^2$.

这正是碰撞粒子流密度的一般定义($v_1$, $v_2$ 为碰撞粒子的速度)①.由此可见,截面公式为

$$d\sigma=(2\pi)^4\delta^{(4)}(P_f-P_i)|M_{fi}|^2\frac{1}{4I}\prod_a\frac{d^3p'_a}{(2\pi)^3 2\varepsilon'_a}. \tag{64.18}$$

在终态也只有两个粒子的情形下,由上式消去 $\delta$ 函数,可以把它写成最后形式. 让我们在质心坐标系中研究这个过程. 设 $\varepsilon=\varepsilon_1+\varepsilon_2=\varepsilon'_1+\varepsilon'_2$ 为总能量, $\boldsymbol{p}_1=-\boldsymbol{p}_2\equiv\boldsymbol{p}$ 和 $\boldsymbol{p}'_1=-\boldsymbol{p}'_2\equiv\boldsymbol{p}'$ 为初态动量和终态动量. 如推导式(64.13)时那样消去 $\delta$ 函数,于是我们得到

$$d\sigma=\frac{1}{64\pi^2}|M_{fi}|^2\frac{|\boldsymbol{p}'|}{|\boldsymbol{p}|\varepsilon^2}do' \tag{64.19}$$

(在弹性散射中,碰撞时粒子的性质不改变: $|\boldsymbol{p}'|=|\boldsymbol{p}|$).

这个公式还可以改写成另外一种形式, 为此, 引入一个不变量

$$\begin{aligned}t&\equiv(p_1-p'_1)^2=m_1^2+m_1'^2-2(p_1p'_1)\\&=m_1^2+m_1'^2-2\varepsilon_1\varepsilon'_1+2|\boldsymbol{p}_1||\boldsymbol{p}'_1|\cos\theta,\end{aligned} \tag{64.20}$$

$\theta$ 为 $\boldsymbol{p}_1$ 和 $\boldsymbol{p}'_1$ 之间的夹角. 在质心坐标系中, 动量 $|\boldsymbol{p}_1|\equiv|\boldsymbol{p}|$ 和 $|\boldsymbol{p}'_1|\equiv|\boldsymbol{p}'|$ 仅仅由总能量 $\varepsilon$ 决定,当 $\varepsilon$ 给定后,

$$dt=2|\boldsymbol{p}||\boldsymbol{p}'|d\cos\theta. \tag{64.21}$$

所以,在式(64.19)中代换,

$$do'=-d\varphi d\cos\theta=\frac{d\varphi d(-t)}{2|\boldsymbol{p}||\boldsymbol{p}'|},$$

$\varphi$ 为 $\boldsymbol{p}'_1$ 对 $\boldsymbol{p}_1$ 的方位角②. 因此,

---

① 在任意参考系中,

$$j=\frac{1}{V}\sqrt{(\boldsymbol{v}_1-\boldsymbol{v}_2)^2-(\boldsymbol{v}_1\times\boldsymbol{v}_2)^2}.$$

此式可以化成 $\boldsymbol{v}_1/\!/\boldsymbol{v}_2$ 情形下的一般流密度,因而,

$$j=|\boldsymbol{v}_1-\boldsymbol{v}_2|/V.$$

② 在这类情形中,微分的符号是显而易见的. 下面为简单起见, 我们将把 $d(-t)$ 写成 $dt$,等等.

$$d\sigma=\frac{1}{64\pi}|M_{fi}|^2\frac{dt}{I^2}\frac{d\varphi}{2\pi}\tag{64.22}$$

(我们根据式(64.16) 再次引入不变量 $I$). 方位角 $\varphi$ 以及形式为(64.22) 的截面在不改变粒子相对运动方向的洛伦兹变换下是不变的. 如果截面不依赖于方位角,公式 (64.22) 将取特别简单的形式:

$$d\sigma=\frac{1}{64\pi}|M_{fi}|^2\frac{dt}{I^2}.\tag{64.23}$$

如果有一个碰撞粒子非常重(它的状态不因碰撞而改变), 那么它在碰撞过程中所起的作用就是一个不动的恒定场源, 另一个粒子就在这个场中被散射. 由于在恒定场中系统的能量守恒(而不是动量!),当这样理解碰撞过程时, 就可以把 $S$ 矩阵元写成

$$S_{fi}=i2\pi\delta(E_f-E_i)T_{fi}.\tag{64.24}$$

在 $|S_{fi}|^2$ 的表达式中,一维 $\delta$ 函数的平方应当理解为

$$[\delta(E_f-E_i)]^2\to\frac{1}{2\pi}\delta(E_f-E_i)t.$$

然后, [像推导式(64.11)那样] 将 $T_{fi}$ 换成 $M_{fi}$, 就得到在恒定场中一个粒子被散射而在终态产生一定数目别的粒子的过程的几率:

$$dw=2\pi\delta(E_f-\varepsilon)|M_{fi}|^2\frac{1}{2\varepsilon V}\prod_a\frac{d^3p'_a}{(2\pi)^3 2\varepsilon'_a}.$$

在这里,$\varepsilon(=E_i)$仍是初态粒子的能量. $\boldsymbol{p}'_a$ 和 $\varepsilon'_a$ 是终态粒子的动量和能量. 散射截面由 $dw$ 除以流密度 $j=v/V$ 得到, $v=|\boldsymbol{p}|/\varepsilon$ 为散射粒子的速度. 最后,从结果中消去归一化体积,我们得到

$$d\sigma=2\pi\delta(E_f-\varepsilon)|M_{fi}|^2\frac{1}{2|\boldsymbol{p}|}\prod_a\frac{d^3p'_a}{(2\pi)^3 2\varepsilon'_a}.\tag{64.25}$$

在弹性散射的特殊情形下,终态也是一个具有同样动量(在数值上) 和同样能量的粒子. 进行代换 $d^3p'\to \boldsymbol{p}^2 d|\boldsymbol{p}'|do'=$

$|\boldsymbol{p}'|\varepsilon'\mathrm{d}\varepsilon'\mathrm{d}o'$,并对 $\mathrm{d}\varepsilon'$ 积分消去 $\delta(\varepsilon'-\varepsilon)$，我们得到截面

$$\mathrm{d}\sigma=\frac{1}{16\pi^2}|M_{fi}|^2\mathrm{d}o'. \tag{64.26}$$

最后，如果外场依赖于时间(譬如说，做一定运动的粒子系的场)，$S$ 矩阵中也就没有能量的 $\delta$ 函数．这时，$S_{fi}=\mathrm{i}T_{fi}$，将 $T_{fi}$ 按式(64.10)换成 $M_{fi}$ 以后，例如说，场产生一组确定数量的粒子，这一过程的几率为

$$\mathrm{d}w=|M_{fi}|^2\prod_a\frac{\mathrm{d}^3p'_a}{(2\pi)^3 2\varepsilon'_a}. \tag{64.27}$$

## §65. 极化粒子的反应

在这一节中我们将用一个简单例子说明，计算散射截面时怎样考虑参加反应的粒子的极化态．

设初态和终态各有一个电子．这时，散射振幅的形式为

$$M_{fi}=\bar{u}'Au(\equiv\bar{u}'_i A_{ik}u_k), \tag{65.1}$$

式中 $u$ 和 $u'$ 为初态和终态电子的双旋量振幅，$A$ 为某个矩阵(与参加反应的其它粒子——如果有的话——的动量和极化有关)．

散射截面和 $|M_{fi}|^2$ 成正比．由于

$$(\bar{u}'Au)^*=u'\gamma^{0*}A^*u^*=u^*A^+\gamma^{0+}u'\quad.$$

或者

$$(\bar{u}'Au)^*=\bar{u}\bar{A}u'. \tag{65.2}$$

式中①

$$\bar{A}=\gamma^0A^+\gamma^0,$$

因而

---

① 由于构成矩阵 $A$ 的需要，为了后面引用方便，我们给出下列等式(其正确性是不难证明的)：

$$\bar{\gamma}^\mu=\gamma^\mu,\ \overline{\gamma^\mu\gamma^\nu\cdots\gamma^\rho}=\gamma^\rho\cdots\gamma^\nu\gamma^\mu,\ \bar{\gamma}^5=-\gamma^5,\ \overline{\gamma^5\gamma^\mu}=\gamma^5\gamma^\mu. \tag{65.2a}$$

$$|M_{fi}|^2=(\bar{u}'Au)(\bar{u}\bar{A}u')\equiv u'_i\bar{u}'_k A_{kl}u_l\bar{u}_m\bar{A}_{mi}. \qquad (65.3)$$

如果初态电子处于密度矩阵为 $\rho$ 的混合态(部分极化的)，如果我们想要求出终态电子处于一定极化态 $\rho'$的过程的截面，就必须对双旋量振幅分量之积进行代换:

$$u'_i\bar{u}'_k\to\rho'_{ik},\quad u_l\bar{u}_m\to\rho_{lm}.$$

于是

$$|M_{fi}|^2=\mathrm{Sp}(\rho'A\rho\bar{A}). \qquad (65.4)$$

密度矩阵 $\rho$ 和 $\rho'$ 由公式(29.13)给出:

$$\rho=\frac{1}{2}(\gamma p+m)[1-\gamma^5(\gamma a)] \qquad (65.5)$$

($\rho'$ 与之相似).

如果初态电子是未极化的，那么

$$\rho=\frac{1}{2}(\gamma p+m). \qquad (65.6)$$

用此式进行代换等价于对电子的极化求平均. 如果想要确定终态电子具有任意极化的散射截面，还必须假设 $\rho'=(\gamma p'+m)/2$, 并将结果乘以 2; 这个运算等价于对电子的极化求和. 因此我们得到:

$$\frac{1}{2}\sum_{\text{极化}}|M_{fi}|^2=\frac{1}{2}\mathrm{Sp}\{(\gamma p'+m)A(\gamma p+m)\bar{A}\}, \qquad (65.7)$$

式中的$\sum\limits_{\text{极化}}$表示对初、终态极化求和，而因子 1/2 使一种求和变成求平均.

式(65.4)中的密度矩阵$\rho'$是一个辅助量，本质上，它表征把终态电子的两种极化分开的检测器性质，而不是这种散射过程的性质. 于是出现了由散射过程本身产生的电子的极化态问题. 如果 $\rho^{(f)}$ 表示这种态的密度矩阵，那么在 $\rho'$ 态中检测到电子的几率可

以由$\rho^{(f)}$在$\rho'$上的投影即$\mathrm{Sp}(\rho^{(f)}\rho')$得到．这个量和相应的截面即$|M_{fi}|^2$成正比．和(65.4)比较，我们得到

$$\rho^{(f)}\sim A\rho\bar{A}. \tag{65.8}$$

我们知道，$\rho^{(f)}$应该具有形式(65.5)，其中含有某个四维矢量$a^{(f)}$，我们只需确定后者．为此，可以利用公式(29.14)，但是用下面所说的方法更简单．

我们在§29中看到，四维矢量$a$的分量可以用三维矢量$\zeta$的分量表示，$\zeta$是电子在其静止参考系中的(二倍)自旋平均值．电子的极化态完全由这些矢量确定，用它们表示散射截面也很方便．显然，无论是对初态电子的矢量$\zeta$，还是对终态电子的矢量$\zeta'$，$|M_{fi}|^2$都是线性的．作为$\zeta'$的函数，它具有如下形式：

$$|M_{fi}|^2=\alpha+\boldsymbol{\beta}\cdot\boldsymbol{\zeta}', \tag{65.9}$$

这里的$\alpha$和$\boldsymbol{\beta}$本身都是$\zeta$的线性函数．

式(65.9)中的矢量$\boldsymbol{\zeta}'$是由检测器分出来的终态电子的特定极化．和密度矩阵$\rho^{(f)}$对应的矢量$\boldsymbol{\zeta}^{(f)}$不难用下面的方法求出．根据上面的论证，

$$|M_{fi}|^2\sim\mathrm{Sp}(\rho'\rho^{(f)}).$$

由于这个量的相对论不变性，可以在任何参考系中计算它．在终态电子的静止参考系中，根据(29.20)，我们有

$$\rho'\rho^{(f)}\sim(1+\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{\zeta}')(1+\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{\zeta}^{(f)})$$

所以

$$|M_{fi}|^2\sim1+\boldsymbol{\zeta}'\cdot\boldsymbol{\zeta}^{(f)}.$$

与(65.9)比较，我们求出

$$\boldsymbol{\zeta}^{(f)}=\boldsymbol{\beta}/\alpha. \tag{65.10}$$

由此可见，算出作为参数$\boldsymbol{\zeta}'$的函数的截面，也就给出了极化$\boldsymbol{\zeta}^{(f)}$．

在初态电子数或终态电子数大于1的较复杂情形下，计算方法和上述相类似．

例如，初态和终态各有两个电子，散射振幅将具有如下形式：

$$M_{fi}=(\bar{u}'_1 A u_1)(u'_2 B u_2)+(\bar{u}'_2 C u_1)(\bar{u}'_1 D u_2),$$

式中 $u_1$、$u_2$ 为初态电子的双旋量振幅，$u'_1$、$u'_2$ 为终态电子的双旋量振幅. 构成平方 $|M_{fi}|^2$ 时，将出现形如

$$|\bar{u}'_1 A u_1|^2 |\bar{u}'_2 B u_2|^2$$

和

$$(\bar{u}'_1 A u_1)(\bar{u}'_2 B u_2)(\bar{u}'_2 C u_1)^*(\bar{u}'_1 D u_2)^*$$

的项，前者可以化成形如(65.4)的两个迹的乘积，后者可以化成如下形式的迹：

$$\mathrm{Sp}(\rho'_1 A \rho_1 \bar{C} \rho'_2 B \rho_2 \bar{D}).$$

正电子用"负频率"的振幅 $u(-p)$ 描述. 在有正电子参加的反应中，和上述分析的唯一区别是密度矩阵的表达式中 $m$ 前的符号与(65.5)、(65.6)中不同[比较式(29.16)和(29.17)].

我们来研究参加反应的光子的极化态.

每一个初态光子的极化以四维矢量 $e$ 的形式（而每一个终态光子以 $e^*$ 的形式）线性地出现在散射振幅中. 在每一种情形下，在截面（即 $|M_{fi}|^2$）中都出现四维张量 $e_\mu e_\nu^*$. 为了过渡到任意的部分极化态的情形，这个张量应该由四维密度矩阵（四维张量 $\rho_{\mu\nu}$）代替

$$e_\mu e_\nu^* \to \rho_{\mu\nu}. \tag{65.11}$$

特别是，对于非极化光子，按照(8.15)，

$$\rho_{\mu\nu}=-\frac{1}{2}g_{\mu\nu}. \tag{65.12}$$

由此可见，对光子极化的平均等价于在 $|M_{fi}|^2$ 中对相应的两个张量指标 $\mu\nu$ 进行缩并①.

---

① 式(65.12) 把对光子的两个实际可能的极化求平均化成对四维矢量 $e$ 的四个独立方向求平均.

如果想要对光子的极化求和而不是求平均，就必须用二倍的量代替 $e_\mu e_\nu^*$:

$$e_\mu e_\nu^* \to -g_{\mu\nu}. \tag{65.13}$$

极化光子的密度矩阵由公式(8.17)给出．式中所出现的四维矢量 $e^{(1)}$、$e^{(2)}$的选择通常由问题的具体条件决定．在一些情形中，这些矢量与某个参考系中确定的空间方向相关；在另一些情形中，把这些矢量与问题中所出现的特征四维矢量——粒子的四维动量联系起来更为方便．

在式(8.17)中，光子的极化用组成"矢量"$\xi=(\xi_1, \xi_2, \xi_3)$的斯托克斯参数描述．与电子的情形一样，必须把终态光子的极化 $\xi^{(f)}$与检测器分出来的极化 $\xi'$ 区别开来．如果已知散射振幅的平方是参数 $\xi'$ 的函数：

$$|M_{fi}|^2=\alpha+\beta\cdot\xi',$$

那么，和式(65.10)完全类似，极化 $\xi^{(f)}=\beta/\alpha$.

## §66. 运动学不变量

我们来研究初态和终态均只有两个粒子的散射过程中几个运动学关系式．这些关系式是从一些普遍的守恒定律导出的，因而其正确性既和粒子的性质无关，又和粒子间的相互作用规律无关．

我们把四维动量守恒定律写成一般形式，在这里，没有预先规定哪个动量属于初态粒子，哪个动量属于终态粒子：

$$q_1+q_2+q_3+q_4=0. \tag{66.1}$$

在这里，$\pm q_a$ 为四维动量矢量，其中两个属于入射粒子，另外两个属于散射粒子。散射粒子的动量为$-q_a$．所以两个 $q_a$ 的时间分量 $q_a^0>0$，两个 $q_a$ 的时间分量 $q_a^0<0$.

除了四维动量守恒外，还必须遵守荷的守恒定律．在这里，

“荷”不仅仅理解为通常的电荷，而且还可理解为对粒子和反粒子具有相反符号的其它守恒量.

当参加过程的粒子的类型给定后，四维矢量 $q_a$ 的平方就是粒子质量的平方($q_a^2=m_a^2$). 根据时间分量 $q_a^0$ 所取的数值和荷的数值，我们得到三种不同的反应. 这三种过程可以写成

$$\left.\begin{aligned}\text{I)}\quad & 1+2\to 3+4,\\ \text{II)}\quad & 1+\bar{3}\to\bar{2}+4,\\ \text{III)}\quad & 1+\bar{4}\to\bar{2}+3.\end{aligned}\right\}\tag{66.2}$$

在这里，数字代表粒子编号，数字上的短划表示相应的反粒子. 把一种反应变成另一种，即把粒子从公式一端移到另一端，相当于改变对应时间分量 $q_a^0$ 的符号以及载荷的符号(即把粒子换成反粒子). 当然，过程(66.2)的逆反应也是可能的.

(66.2)式的三种过程所讨论的是一个单一的(广义的)反应中的三种交叉通道.

我们来举几个例子. 如果粒子 1 和 3 为电子，2 和 4 为光子，则通道 I 为光子被电子散射；由于光子是真中性粒子，通道 III 与 I 相同. 通道 II 是电子-正电子对变成两个光子. 如果四个粒子都是电子，则通道 I 为电子-电子散射，通道 II 和 III 为正电子-电子散射. 如果粒子 1 和 3 是电子，2 和 4 是 μ 子，则通道 I 为 e-μ 散射，通道 III 为 e-$\bar{\mu}$ 散射，通道 II 为电子对 e$\bar{e}$ 变成 μ 子对 μ$\bar{\mu}$.

研究散射过程时，由四维动量组成的不变量具有特别重要的意义. 不变的散射振幅就是这种四维动量的函数(§ 70).

由四个四维动量可以组成两个独立的不变量. 实际上，由于式(66.1)，只有三个四维矢量 $q_a$ 是独立的. 设这三个 $q_a$ 是 $q_1$, $q_2$, $q_3$. 它们可以组成六个不变量：三个平方量 $q_1^2$、$q_2^2$、$q_3^2$ 和三个乘积 $q_1q_2$、$q_1q_3$、$q_2q_3$. 前三个是已知的质量平方，后三个满足由等

式

$$(q_1+q_2+q_3)^2=q_4^2=m_4^2$$

得出的一个关系式①.

然而，为了得到更大的对称性，考虑三个(而不是两个)不变量较为方便. 这三个不变量可以取

$$\left.\begin{aligned} s&=(q_1+q_2)^2=(q_3+q_4)^2, \\ t&=(q_1+q_3)^2=(q_2+q_4)^2, \\ u&=(q_1+q_4)^2=(q_2+q_3)^2. \end{aligned}\right\} \tag{66.3}$$

不难看出，它们满足关系式

$$s+t+u=h. \tag{66.4}$$

式中

$$h=m_1^2+m_2^2+m_3^2+m_4^2. \tag{66.5}$$

在主通道(I)中，不变量 $s$ 具有简单的物理意义：它是碰撞粒子(1和2)在其质心坐标系中的总能量的平方［当 $\boldsymbol{p}_1+\boldsymbol{p}_2=0$ 时，$s=(\varepsilon_1+\varepsilon_2)^2$］. 在通道(II)中，不变量 $t$ 具有类似的意义；而在通道(III)中，不变量 $u$ 也具有类似的意义. 因此，常常把通道I、II、III叫做 $s$ 通道、$t$ 通道和 $u$ 通道.

不难用每一个通道中碰撞粒子的能量和动量来表示每个不变量 $s$，$t$，$u$. 我们来研究 $s$ 通道. 在粒子1和2的质心坐标系中，四维矢量 $q_a$ 的时间分量和空间分量是

$$\begin{aligned} q_1&=p_1=(\varepsilon_1, \boldsymbol{p}_s), & q_2&=p_2=(\varepsilon_2, -\boldsymbol{p}_s), \\ q_3&=-p_3=(-\varepsilon_3, -\boldsymbol{p}'_s), & q_4&=-p_4=(-\varepsilon_4, \boldsymbol{p}'_s) \end{aligned} \tag{66.6}$$

---

① 在有 $n(n\geqslant 4)$ 个粒子参加反应的一般情形下，独立的不变量数等于 $3n-10$. 实际上，这时共有 $4n$ 个量：$n$ 个四维动量 $q_a$ 的分量. 它们之间有 $n$ 个函数式 $q_a^2=m_a^2$，守恒定律 $\Sigma q_a=0$ 给出四个关系式. 可以任意取值的有六个量，这个数目与定义一般洛伦兹变换(一般的四维转动)的参数数目是一致的. 所以，独立的不变量数为 $4n-n-4-6=3n-10$.

($\boldsymbol{p}_s, \boldsymbol{p}'_s$ 中的下标 $s$ 表示这些动量属于 $s$ 通道中的反应). 这时

$$s=\varepsilon_s^2, \varepsilon_s=\varepsilon_1+\varepsilon_2=\varepsilon_3+\varepsilon_4; \tag{66.7}$$

$$\left.\begin{aligned} 4s\boldsymbol{p}_s^2&=[s-(m_1+m_2)^2][s-(m_1-m_2)^2],\\ 4s\boldsymbol{p}_s'^2&=[s-(m_3+m_4)^2][s-(m_3-m_4)^2]; \end{aligned}\right\} \tag{66.8}$$

$$\left.\begin{aligned} 2t&=h-s+4\boldsymbol{p}_s\cdot\boldsymbol{p}'_s-\frac{1}{s}(m_1^2-m_2^2)(m_3^2-m_4^2),\\ 2u&=h-s-4\boldsymbol{p}_s\cdot\boldsymbol{p}'_s+\frac{1}{s}(m_1^2-m_2^2)(m_3^2-m_4^2). \end{aligned}\right\} \tag{66.9}$$

在弹性散射中($m_1=m_3$, $m_2=m_4$), 我们有 $|\boldsymbol{p}_s|=|\boldsymbol{p}'_s|$, 因而 $\varepsilon_1=\varepsilon_3, \varepsilon_2=\varepsilon_4$. 这时我们得到比式(66.9)更简单的公式

$$\left.\begin{aligned} t&=-(\boldsymbol{p}_s-\boldsymbol{p}'_s)^2=-2\boldsymbol{p}_s^2(1-\cos\theta_s),\\ u&=-2\boldsymbol{p}_s^2(1+\cos\theta_s)+(\varepsilon_1-\varepsilon_2)^2. \end{aligned}\right\} \tag{66.10}$$

式中 $\theta_s$ 为 $\boldsymbol{p}_s$ 和 $\boldsymbol{p}'_s$ 之间的夹角. 在这里, 不变量 $-t$ 是碰撞中被传递的三维动量的平方.

对于 $t$、$u$ 通道, 只要简单地交换一下指标就得到类似的公式: 对于 $t$ 通道, 只要在式(66.6)—(66.10)中交换 $s$ 和 $t$, 2 和 3; 对于 $u$ 通道则应交换 $s$ 和 $u$, 2 和 4.

## §67. 物理区域

当我们把散射振幅看成独立变量 $s, t, u$ 的函数时(它们仅仅以关系式 $s+t+u=h$ 相联系), 必须区分物理上容许它们取值的区域和不容许取值的区域. 与散射的物理过程对应的值应该满足一些条件, 这些条件来源于四维动量守恒定律和 $q_a^2=m_a^2$(即每一个四维矢量 $q_a$ 的平方都是一个给定量).

两个四维动量之积

$$p_a p_b \geqslant m_a m_b. \tag{67.1}$$

所以，如果 $q_a = p_a, q_b = p_b$（或 $q_a = -p_a, q_b = -p_b$），便有

$$(q_a + q_b)^2 = (p_a + p_b)^2 \geqslant (m_a + m_b)^2;$$

或者如果 $q_a = p_a, q_b = -p_b$，就有

$$(q_a + q_b)^2 = (p_a - p_b)^2 \leqslant (m_a - m_b)^2.$$

因此，对于 $s$ 通道中的反应来说，

$$\left.\begin{array}{l}(m_1 + m_2)^2 \leqslant s \geqslant (m_3 + m_4)^2, \\ (m_1 - m_3)^2 \geqslant t \leqslant (m_2 - m_4)^2, \\ (m_1 - m_4)^2 \geqslant u \leqslant (m_2 - m_3)^2\end{array}\right\} \tag{67.2}$$

（在 $t$ 通道和 $u$ 通道中，也有类似的不等式）.

为了找到其余的条件，我们构造一个和任意三个四维矢量 $q_a$ 之积对偶的四维矢量 $L$，例如

$$L_\lambda = e_{\lambda\mu\nu\rho} q_1^\mu q_2^\nu q_3^\rho. \tag{67.3}$$

在一个粒子（譬如说，粒子 1）的静止参考系中，$q_1 = (q_1^0, 0)$. 这时 $L$ 只有空间分量：$L_i = e_{i0kl} q_1^0 q_2^k q_3^l$. 所以，$L$是类空间矢量，在任意参考系中，$L^2 \leqslant 0$. 将 $L^2$ 展开，我们得到条件

$$\begin{vmatrix} q_1^2 & q_1 q_2 & q_1 q_3 \\ q_2 q_1 & q_2^2 & q_2 q_3 \\ q_3 q_1 & q_3 q_2 & q_3^2 \end{vmatrix} \geqslant 0. \tag{67.4}$$

这个条件可以通过不变量 $s, t, u$ 对几个通道写成同一的形式：

$$stu \geqslant as + bt + cu, \tag{67.5}$$

式中

$$\left.\begin{array}{l} ah = (m_1^2 m_2^2 - m_3^2 m_4^2)(m_1^2 + m_2^2 - m_3^2 - m_4^2), \\ bh = (m_1^2 m_3^2 - m_2^2 m_4^2)(m_1^2 + m_3^2 - m_2^2 - m_4^2), \\ ch = (m_1^2 m_4^2 - m_2^2 m_3^2)(m_1^2 + m_4^2 - m_2^2 - m_3^2), \end{array}\right\} \tag{67.6}$$

（T. W. B. Kibble, 1960）.

为了图示变量 $s, t, u$ 的取值区域，比较方便的办法是利用平

面内的三角坐标（所谓曼德尔施塔姆平面；S. Mandelstam, 1958）：坐标轴是三条直线，相交构成等边三角形．沿着与这三条直线垂直的方向计算坐标$s, t, u$（指向三角形内部的方向为正，如图 5 中的箭头所示）．这样一来，平面内的每一个点都有对应的 $s$，$t$，$u$

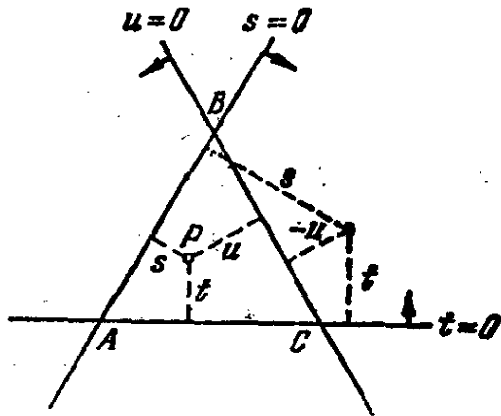



图 5

值，其大小(连同符号)由该点到三个轴的垂线长度表示．基于已知的几何定理，条件 $s+t+u=h$ 成立（假设等边三角形的高为 $h$）①．

我们来研究主通道($s$)为弹性散射的重要情形．这时，粒子的质量两两相等：

$$m_1=m_3\equiv m,\qquad m_2=m_4\equiv\mu. \tag{67.7}$$

设 $m>\mu$．在条件(67.5)中我们有

$$h=2(m^2+\mu^2),\quad a=c=0,\quad b=(m^2-\mu^2)^2,$$

因而

$$sut\geqslant(m^2-\mu^2)^2t. \tag{67.8}$$

由这个不等式决定的区域的边界包括直线 $t=0$ 和双曲线

$$su=(m^2-\mu^2)^2, \tag{67.9}$$

这个双曲线的两支分别在扇形 $u<0, s<0$ 和扇形 $s>0$，$u>0$ 内，而轴 $s=0$ 和 $u=0$ 为双曲线的渐近线．式(67.8)现在可以写成

$$t>0,\quad su>(m^2-\mu^2)^2\quad 或\quad t<0,\quad su<(m^2-\mu^2)^2.$$

此外，根据条件(67.2)，在 $s$ 通道中还必须考虑不等式 $s>(m+$

① 例如，把 $P$ 点(图 5)与三角形 $ABC$ 的三个顶点连接起来，我们得到高分别为 $s, t, u$ 的三个三角形，其面积之和等于三角形 $ABC$ 的面积，于是我们得到所求的关系式．当 $P$ 点在三角形 $ABC$ 外时，也可以用同样的方法证明．

$\mu)^2$，在 $u$ 通道中还必须考虑 $u>(m+\mu)^2$；这时，其它不等式必然成立。于是我们发现，通道 I, II, III$(s, t, u)$ 对应于图 6 中的阴影部分，称为物理区域。

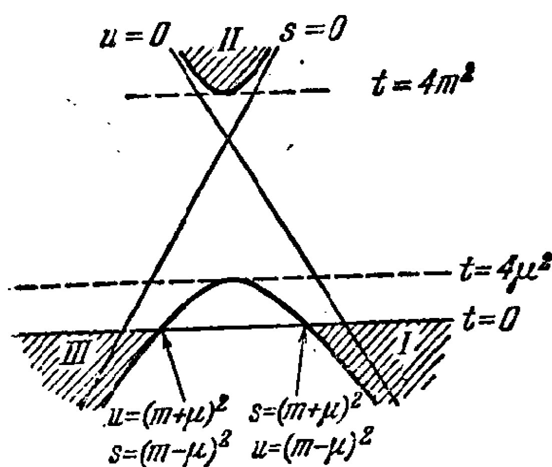



图 6

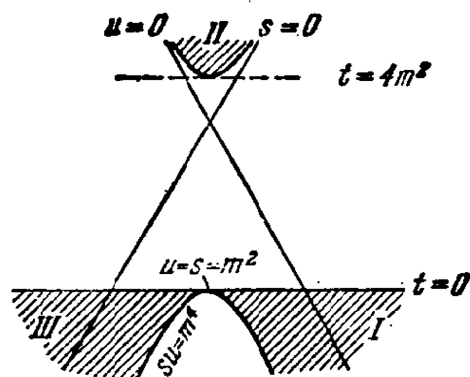



图 7

如果 $\mu=0$，（粒子 2, 4 为光子），双曲线的下支和轴 $t=0$ 相切，物理区域如图 7 所示。

如果 $m=\mu$，则式(67.8)的区域边界和坐标轴重合，物理区域为图 8 所示的三个扇形。

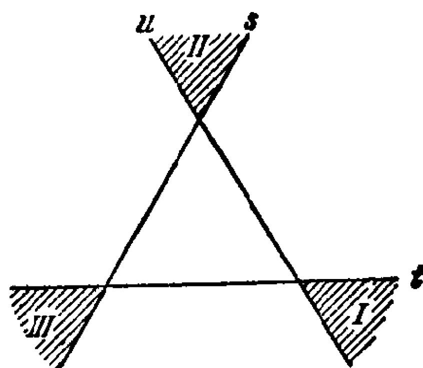



图 8

在四个质量都不相等的一般情形下，方程

$$stu=as+bt+cu \tag{67.10}$$

决定一个三次曲线，它的各支就是三个物理通道的物理区域的边界，如图 9 所示。设

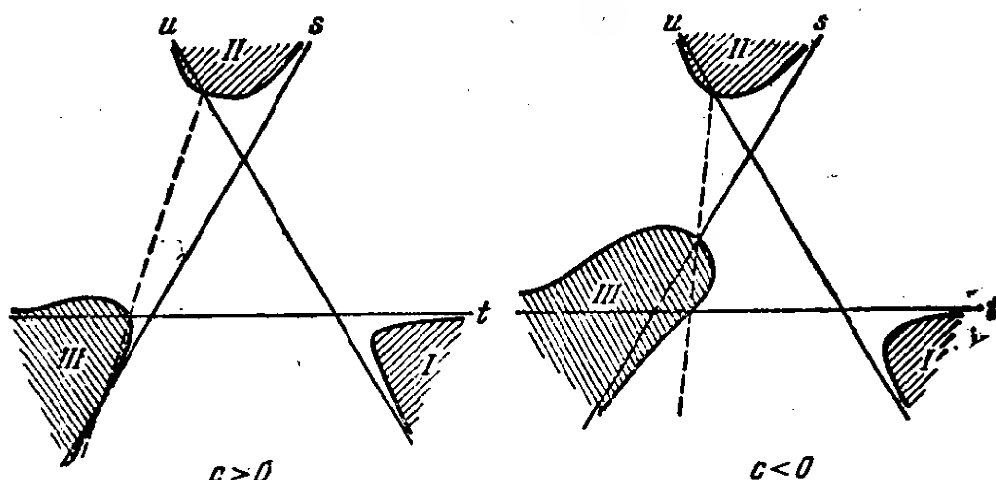



图 9

$$m_1 \geqslant m_2 \geqslant m_3 \geqslant m_4.$$

这时

$$a \geqslant b \geqslant c, \qquad a>0, \qquad b>0.$$

曲线(67.10)和坐标轴的交点在直线

$$as+bt+cu=0$$

上(参看图 9 中的虚线). 这条直线与 $c$ 的符号关系如图 9 所示. 当 $c<0$ 时, $u$ 通道的物理区域包含一部分坐标三角形的面积. 因而,在这种情形下,量 $s, t, u$ 可以同时为正. 边界曲线的三支都以相应的坐标轴作为渐近线[利用关系式 $s+t+u=h$ 从方程(67.10)中消去一个变量, 然后令其余两个变量中的一个趋于无限大, 就能证明这一点]. 一般来说, 除了方程(67.10)所确定的边界以外, 条件(67.2)不再会给出任何新东西. 与(67.2)中的等号相应的直线和图 9 中画阴影线的物理区域不相交, 其中有的和这些区域的边界相切,对应于变量 $s, t$ 或 $u$ 在相应通道中的极值.

当一个粒子的质量大于其余三个的质量和时 ($m_1>m_2+m_3+m_4$),除了通道 I,II, III 以外, 还可能有第四个反应通道, 对应于蜕变

$$\text{IV)}\ 1 \longrightarrow \bar{2}+3+4. \tag{67.11}$$

对于这个通道，在蜕变粒子的静止参考系中，

$$q_1=(m_1,0),\quad q_2=(-\varepsilon_2,-\boldsymbol{p}_2),\quad q_3=(-\varepsilon_3,-\boldsymbol{p}_3),$$

$$q_4=(-\varepsilon_4,-\boldsymbol{p}_4),\quad \varepsilon_2+\varepsilon_3+\varepsilon_4=m_1,\quad \boldsymbol{p}_2+\boldsymbol{p}_3+\boldsymbol{p}_4=0.$$

不变量为

$$\left.\begin{aligned}s&=m_1^2+m_2^2-2m_1\varepsilon_2,\\ t&=m_1^2+m_3^2-2m_1\varepsilon_3,\\ u&=m_1^2+m_4^2-2m_1\varepsilon_4.\end{aligned}\right\}\tag{67.12}$$

由式(67.1)，现在我们可以得到：

$$\left.\begin{aligned}(m_3+m_4)^2&\leqslant s\leqslant(m_1-m_2)^2,\\ (m_2+m_4)^2&\leqslant t\leqslant(m_1-m_3)^2,\\ (m_2+m_3)^2&\leqslant u\leqslant(m_1-m_4)^2.\end{aligned}\right\}\tag{67.13}$$

由此可见，三个不变量都是正的．所以，蜕变通道的物理区域在坐标三角形的内部．

## 习　　题

1．求物理区域．设三个质量相同：$m_1\equiv m, m_2=m_3=m_4\equiv\mu$（例如，反应 $K+\pi\longrightarrow\pi+\pi$）．

**解**　方程(67.10)可以写成

$$stu=\mu^2(m^2-\mu^2)^2,\tag{1}$$

而且

$$s+t+u=3\mu^2+m^2.$$

区域 I, II, III 以形状相同的三条曲线为边界（对于 I：$s>0$, $t<0, u<0$；对于 II 和 III 也是一样）．如果 $m>3\mu$，则方程(1)也有一个分支（闭合曲线）：$s>0, t>0, u>0$ 形成通道 IV 的区域边界（图 10）．

2．同上题，设 $m_1\equiv m, m_2\equiv\mu, m_3=m_4=0$，$m>\mu$（例如，反应 $\mu+\nu\longrightarrow e+\nu$）．

**解**　条件(67.5)可以写成

$$stu\geqslant m^2\mu^2 s,$$

而且 $s+t+u=m^2+\mu^2$．物理区域的边界为轴 $s=0$ 和双曲线 $tu=m^2\mu^2$ 的

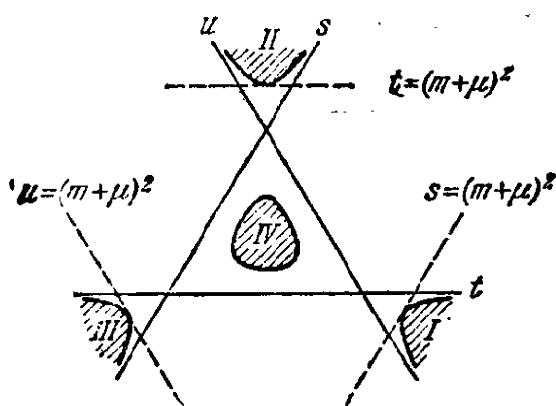



图 10

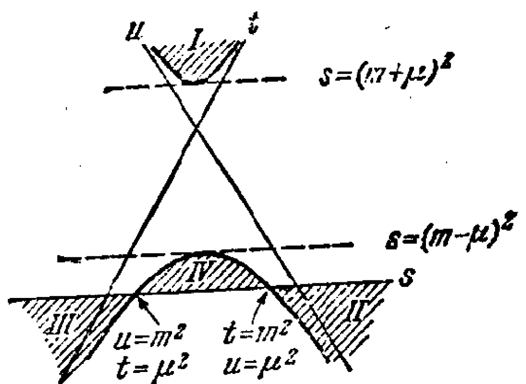



图 11

两支(图 11).

3. 同上题，设 $m_1=m_3\equiv m$，$m_2=0$，$m_4\equiv\mu$，并且 $m>2\mu$(例如，反应 $p+\gamma\longrightarrow p+\pi^0$).

**解** 边界方程(67.10)变成

$$stu=a(s+u)+bt,$$

$$ah=m^2\mu^4,\quad bh=m^4(2m^2-\mu^2),\quad h=2m^2+\mu^2.$$

消去 $u$，我们得到

$$t^2+\left(\frac{b-a}{s}+s-h\right)t+\frac{ah}{s}=0.$$

当 $s$ 给定时，这是 $t$ 的二次方程. 在 $s>(m+\mu)^2$ 的条件下（$s$ 通道的区域），每一个 $s$ 对应着两个负的 $t$ 值. 当 $s=(m+\mu)^2$ 时，二次方程的两根相等：$t=-m\mu^2/(m+\mu)$. $s$ 通道的区域边界如图 12 所示. 边界曲线的下面一支以轴 $u=0$ 为渐近线，而上面的一支和此轴交于点 $t=\mu^4/(\mu^2-m^2)$.

$u$ 通道的区域和 $s$ 通道的区域是对称的，而 $t$ 通道的区域如图 12 所示.

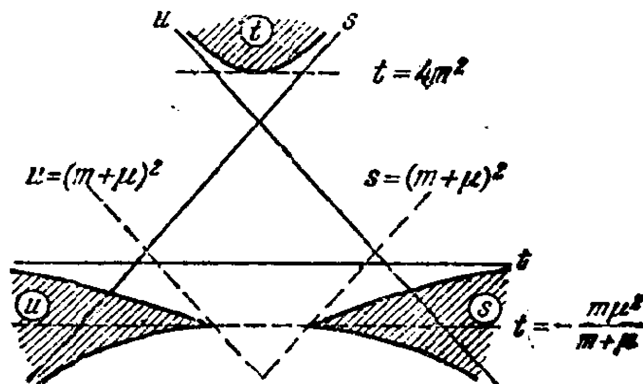



图 12

## § 68. 按分波振幅展开

当分析

$$a+b \longrightarrow c+d \tag{68.1}$$

这种类型的反应时，重要的一步是把散射振幅展成分波振幅．在粒子的质心坐标系中，每一个分波振幅（在总能量 $\varepsilon$ 给定的条件下）都对应着粒子的一个确定的总角动量值 $J$①.

由此可见，这些分波振幅是动量表象中的 $S$ 矩阵元

$$\langle \varepsilon J'M'|S|\varepsilon JM\rangle.$$

因为角动量 $J$ 及其在给定 $z$ 轴上的分量 $M$ 守恒，所以 $S$ 矩阵对它们(以及能量 $\varepsilon$) 是对角化的．由于空间各向同性，因而对角元素与 $M$ 值无关．当 $J, M, \varepsilon$ 给定后，散射矩阵仍然是关于自旋量子数的矩阵，我们将这个矩阵的元素写成更简明的形式：

$$\langle \varepsilon JM\lambda'|S|\varepsilon JM\lambda\rangle \equiv \langle \lambda'|S^J_{(\varepsilon)}|\lambda\rangle, \tag{68.2}$$

式中 $\lambda$ 和 $\lambda'$ 是一组自旋量子数，在这里它们很自然地被看作是粒子的螺旋性．和自旋在空间任意轴上的分量不同，螺旋性对自由粒子也守恒．它既与粒子的动量对易，又与粒子的角动量对易（§ 16）．因而，在散射矩阵的动量表象和角动量表象中，螺旋性均可使用．

按照螺旋性指标写出的 $S$ 矩阵元叫**螺旋性散射振幅**，因而 $\lambda$ 和 $\lambda'$ 分别代表初态粒子和终态粒子的螺旋性：$\lambda=(\lambda_a, \lambda_b)$，$\lambda'=(\lambda_c, \lambda_d)$.

在动量表象中，散射矩阵元是对态 $|\varepsilon \boldsymbol{n}\lambda\rangle$ 定义的（其中的 $\boldsymbol{n}=\boldsymbol{p}/|\boldsymbol{p}|$ 是质心坐标系中相对运动的动量方向）；而在角动量表象中是对态 $|\varepsilon JM\lambda\rangle$ 定义的．它们通过展开式

---

① § 68，§ 69 中的大部分结果都来源于 M. Jacob 和 G. C. Wick 的工作(1959).

$$|JM\lambda\rangle=\int|\boldsymbol{n}\lambda\rangle\langle\boldsymbol{n}\lambda|JM\lambda\rangle\mathrm{d}o_{\boldsymbol{n}} \qquad (68.3)$$

互相联系，式中的积分是对方向 $\boldsymbol{n}$ 进行的(为简单起见，在态的符号中略去了能量 $\varepsilon$). 由于这个变换是幺正的(参看第三卷 § 12)，逆变换的系数为

$$\langle JM\lambda|\boldsymbol{n}\lambda\rangle=\langle\boldsymbol{n}\lambda|JM\lambda\rangle^{*}. \qquad (68.4)$$

按照矩阵变换的一般法则，这两个系数决定了两个表象中的 $S$ 矩阵元之间的关系：

$$\langle\boldsymbol{n}'\lambda'|S|\boldsymbol{n}\lambda\rangle=\sum_{JM}\langle\boldsymbol{n}'\lambda'|JM\lambda'\rangle\langle JM\lambda'|S|JM\lambda\rangle\langle JM\lambda|\boldsymbol{n}\lambda\rangle. \qquad (68.5)$$

利用 § 16 的结果，不难求出展开式(68.3)的系数.

设所有态的波函数都在动量表象中表达，即可以写成动量方向的函数(在能量为已知的条件下). 作为一个独立参数，这个方向用 $\boldsymbol{\nu}$ 表示，以区别作为态的量子数的方向 $\boldsymbol{n}$. 在这个表象中，波函数具有(16.2)的形式：

$$\psi_{\boldsymbol{n}\lambda}(\boldsymbol{\nu})=u^{(\lambda)}\delta^{(2)}(\boldsymbol{\nu}-\boldsymbol{n}). \qquad (68.6)$$

将式(68.6)代入(68.3)，后者化为一项：

$$\psi_{JM\lambda}=\langle\boldsymbol{\nu}\lambda|JM\lambda\rangle u^{(\lambda)} \qquad (68.7)$$

两个粒子的螺旋性 $\lambda_a$ 和 $\lambda_b$ 定义为粒子自旋在各自的动量方向上的分量. 如果粒子的动量 $\boldsymbol{p}_a\equiv\boldsymbol{p}, \boldsymbol{p}_b=-\boldsymbol{p}$，则第一个粒子的动量方向为 $\boldsymbol{n}$，第二个粒子的为 $-\boldsymbol{n}$. 现在如果把系统看成在方向 $\boldsymbol{n}$ 上具有螺旋性 $\Lambda$ 的一个单一的粒子，则 $\Lambda=\lambda_a-\lambda_b$. 根据式(16.4)，它的波函数(在动量表象中)可以写成

$$\psi_{JM\lambda}(\boldsymbol{\nu})=u^{(\lambda)}D^{(J)}_{\Lambda M}(\boldsymbol{\nu})\sqrt{\frac{2J+1}{4\pi}}. \qquad (68.8)$$

比较(68.7)和(68.8)，并且把 $\boldsymbol{\nu}$ 换成 $\boldsymbol{n}$，我们就得到所求的系数

$$\langle\boldsymbol{n}\lambda|JM\lambda\rangle=\sqrt{\frac{2J+1}{4\pi}}D^{(J)}_{\Lambda M}(\boldsymbol{n}). \qquad (68.9)$$

把这些系数代入式(68.5)，我们得到

$$\langle \boldsymbol{n}'\lambda'|S|\boldsymbol{n}\lambda\rangle=\sum_{JM}\frac{2J+1}{4\pi}D^{(J)}_{\Lambda'M}(\boldsymbol{n}')D^{(J)*}_{\Lambda M}(\boldsymbol{n})\langle\lambda'|S^J|\lambda\rangle, \tag{68.10}$$

$$\Lambda=\lambda_a-\lambda_b,\ \Lambda'=\lambda_c-\lambda_d,$$

式中采用了简化符号(68.2). 如果取方向 $\boldsymbol{n}$ 作为 $z$ 轴，则

$$D^{(J)}_{\Lambda M}(\boldsymbol{n})=\delta_{\Lambda M},$$

且式(68.10)变成如下形式：

$$\langle \boldsymbol{n}'\lambda'|S|\boldsymbol{n}\lambda\rangle=\sum_{J}\frac{2J+1}{4\pi}D^{(J)}_{\Lambda'\Lambda}(\boldsymbol{n}')\langle\lambda'|S^J|\lambda\rangle. \tag{68.11}$$

我们看到，按分波振幅展开的表达式中，函数 $D^{(J)}_{\Lambda'\Lambda}$ 是作为系数出现的. 对于式(68.1)那样的反应，较为方便的做法是定义一个散射振幅$f$，使质心坐标系中的截面为

$$\mathrm{d}\sigma=|\langle\boldsymbol{n}'\lambda'|f|\boldsymbol{n}\lambda\rangle|^2\mathrm{d}o' \tag{68.12}$$

与(64.19)比较，可以把这个振幅与矩阵元 $M_{fi}$ 联系起来]. 散射振幅按分波振幅展开时可以写成

$$\langle \boldsymbol{n}'\lambda'|f|\boldsymbol{n}\lambda\rangle=\sum_{JM}(2J+1)D^{(J)}_{\Lambda'M}(\boldsymbol{n}')D^{(J)*}_{\Lambda M}(\boldsymbol{n})\langle\lambda'|f^J|\lambda\rangle, \tag{68.13}$$

或者把 $z$ 轴选在 $\boldsymbol{n}$ 方向上，

$$\langle \boldsymbol{n}'\lambda'|f|\boldsymbol{n}\lambda\rangle=\sum_{J}(2J+1)D^{(J)}_{\Lambda'\Lambda}(\boldsymbol{n}')\langle\lambda'|f^J|\lambda\rangle. \tag{68.14}$$

这个公式是无自旋粒子的散射按分波振幅展开的推广［参看第三卷(123.14)］. 由于 $D^{(L)}_{00}=P_L(\cos\theta)$，当自旋为零时，(68.14)化简为按勒让德多项式的展开：

$$f(\theta)=\sum_{L}(2L+1)f_LP_L(\cos\theta).$$

截面 (68.12) 对应于所有粒子均有确定螺旋性的情形. 如果粒子处于混合极化态，则截面可由下列乘积

$$\langle \lambda_c \lambda_d | f | \lambda_a \lambda_b \rangle \langle \lambda'_c \lambda'_d | f | \lambda'_a \lambda'_b \rangle^*$$

对粒子的极化密度矩阵

$$\langle \lambda_a | \rho^{(a)} | \lambda'_a \rangle \langle \lambda_b | \rho^{(b)} | \lambda'_b \rangle \langle \lambda'_c | \rho^{(c)} | \lambda_c \rangle \langle \lambda'_d | \rho^{(d)} | \lambda_d \rangle$$

求平均而给出(参看 204 页第一个脚注). 例如，当非极化粒子 $a$, $b$ 之间的反应生成非极化粒子 $c, d$ 时，我们有

$$\mathrm{d}\sigma = \frac{\mathrm{d}o}{(2s_a+1)(2s_b+1)} \sum_{(\lambda)} \sum_{JJ'} (2J+1)(2J'+1) \\ \times \langle \lambda_c \lambda_d | f^J | \lambda_a \lambda_b \rangle \times \langle \lambda_c \lambda_d | f^{J'} | \lambda_a \lambda_b \rangle^* D^J_{\Lambda' \Lambda}(\boldsymbol{n}') D^{(J')*}_{\Lambda' \Lambda}(\boldsymbol{n}') \tag{68.15}$$

($z$ 轴在 $\boldsymbol{n}$ 方向上，$\sum\limits_{(\lambda)}$表示对 $\lambda_a$, $\lambda_b$, $\lambda_c$, $\lambda_d$ 求和). 按照第三卷 (58.19) 对函数 $D^{(J')*}_{\Lambda' \Lambda}$ 进行代换，然后利用第三卷 (110.2) 的展开式，最后我们得到

$$\mathrm{d}\sigma = \frac{\mathrm{d}o}{(2s_a+1)(2s_b+1)} \sum_{(\lambda)JJ'} (-1)^{\Lambda-\Lambda'} (2J+1)(2J'+1) \\ \times \langle \lambda_c \lambda_d | f^J | \lambda_a \lambda_b \rangle \langle \lambda_c \lambda_d | f^{J'} | \lambda_a \lambda_b \rangle^* \\ \times \sum_L (2L+1) \begin{pmatrix} J & J' & L \\ \Lambda & -\Lambda & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} J & J' & L \\ \Lambda' & -\Lambda' & 0 \end{pmatrix} P_L(\cos\theta) \tag{68.16}$$

($\theta$ 为 $\boldsymbol{n}'$ 和 $z$ 轴之间的夹角)；对 $L$ 的求和是对 $J$ 和 $J'$ 进行矢量相加时出现的所有整数值进行.

散射振幅按分波振幅的展开式，充分反映出与空间转动对称性相关联的散射角分布的一切性质. 但是，这个展开式并没有明确展现出与空间反演对称性相关联的性质. 如果相互作用还具有 $P$ 不变性，则将导致不同的螺旋性振幅之间的某种关系 (参看 § 69).

## §69. 螺旋性散射振幅的对称性

$P, T, C$ 变换的对称性(如果已知粒子的相互作用过程真正具有这种对称性)所附加的条件,使不同的螺旋性散射振幅之间出现一些确定的联系,从而减少了独立振幅的数目①. 为了确定这种联系,我们首先确定二粒子系统的螺旋性状态的对称性质.

让我们在二粒子的质心坐标系中研究它们. 设一个粒子的动量为 $\boldsymbol{p}_1 \equiv \boldsymbol{p}$, 对方向 $\boldsymbol{p}$ 的螺旋性为 $\lambda_1$; 另一个粒子的动量为 $\boldsymbol{p}_2 = -\boldsymbol{p}$, 对方向 $-\boldsymbol{p}$ 的螺旋性为 $\lambda_2$. 如果两个粒子的螺旋性都对同一个方向 $\boldsymbol{p}$ 定义,其值将是 $\lambda_1$ 和 $-\lambda_2$, 因此,两个粒子将分别用振幅为 $u_{\boldsymbol{p}}^{(\lambda_1)}$ 和 $u_{\boldsymbol{p}}^{(-\lambda_2)}$ 的平面波描述,而二粒子系统将用由 $u_{\boldsymbol{p}}^{(\lambda_1)}$ 和 $u_{\boldsymbol{p}}^{(-\lambda_2)}$ 之积组成的多分量的函数 $u_{\boldsymbol{p}}^{(\lambda_1\lambda_2)}$ 描述.

现在,我们把系统看成在 $\boldsymbol{n} = \boldsymbol{p}/|\boldsymbol{p}|$ 方向上具有螺旋性 $\Lambda = \lambda_1 - \lambda_2$ 的一个粒子. 于是可以对具有一定的 $J, M, \lambda_1, \lambda_2$ (以及总能量 $\varepsilon$)值的态写出波函数(在动量表象中,即作为 $\boldsymbol{n}$ 的函数)

$$\psi_{JM\lambda_1\lambda_2} = u_{\boldsymbol{p}}^{(\lambda_1\lambda_2)} D_{\Lambda M}^{(J)}(\boldsymbol{n}) \sqrt{\frac{2J+1}{4\pi}}, \quad \Lambda = \lambda_1 - \lambda_2 \tag{69.1}$$

[比较(68.8)]. 因为 $\Lambda$ 是总角动量在 $\boldsymbol{p}$ 方向上的分量,所以应该有

$$|\Lambda| \leqslant J. \tag{69.2}$$

根据式(16.14),在反演时,

$$\hat{P} u^{(\lambda_1\lambda_2)}(\boldsymbol{n}) = \eta_1\eta_2 u^{(\lambda_1\lambda_2)}(-\boldsymbol{n}) = \eta_1\eta_2(-1)^{s_1+s_2-\lambda_1+\lambda_2} \times u^{(-\lambda_1-\lambda_2)}(\boldsymbol{n}), \tag{69.3}$$

$\eta_1$, $\eta_2$ 为粒子的内禀宇称. 同样,利用式(16.10)可以求出函数

① 当然,独立振幅的数目本身并不依赖于 $S^J$ 矩阵的具体表象,它对任意选择的自旋变量都一样.

(69.1)的变换规律:

$$\hat{P}\psi_{JM\lambda_1\lambda_2}=\eta_1\eta_2(-1)^{s_1+s_2-J}\psi_{JM-\lambda_1-\lambda_2}. \tag{69.4}$$

如果两个粒子是全同的，还有交换对称性问题. 粒子的交换意味着交换它们的动量和自旋. 为了说明对函数(69.1)应用这一运算的意义，我们注意到在交换的定义中包含着一个不对称性，即两个粒子的角动量在同一矢量 $\boldsymbol{p}_1\equiv\boldsymbol{p}$(第一个粒子的动量)上取分量. 交换以后，这个矢量由 $\boldsymbol{p}_2\equiv-\boldsymbol{p}$ 代替，角动量 $\boldsymbol{j}_1$ 和 $\boldsymbol{j}_2$ 在此矢量上的分量将是 $-\lambda_1$ 和 $\lambda_2$ (而不是在 $\boldsymbol{p}$ 上的分量 $\lambda_1$ 和 $-\lambda_2$). 因此，粒子的交换算符 $\hat{P}_{12}$ 对函数(69.1)作用的结果可以写成

$$\hat{P}_{12}\psi_{JM\lambda_1\lambda_2}=u^{(-\lambda_2-\lambda_1)}(-\boldsymbol{n})D^{(J)}_{\Lambda M}(-\boldsymbol{n})\sqrt{\frac{2J+1}{4\pi}}$$

(式中仍有 $\Lambda=\lambda_1-\lambda_2$). 然后利用式(69.3)和(16.10)，我们求出

$$\hat{P}_{12}\psi_{JM\lambda_1\lambda_2}=(-1)^{2s-J}\psi_{JM\lambda_2\lambda_1}, \tag{69.5}$$

式中的 $s_1=s_2\equiv s$.

对于全同粒子而言，所容许的态只能是交换对称态（对玻色子）或交换反对称态（对费米子）. 由于前者出现在粒子的自旋 $s$ 为整数时，而后者出现在 $s$ 为半整数时，因此在两种情形下，二粒子系统所容许的螺旋性状态可以写成线性组合的形式:

$$[1+(-1)^{2s}\hat{P}_{12}]\psi_{JM\lambda_1\lambda_2},$$

或者根据式(69.5)，写成

$$\psi_{JM\lambda_1\lambda_2}+(-1)^J\psi_{JM\lambda_2\lambda_1}. \tag{69.6}$$

值得注意的是，此式对玻色子和费米子都是一样的.

对于由粒子和反粒子组成的系统而言，交换的结果也可以用公式(69.5)表达. 不过，和全同粒子的情形不同，在这里，两种交换对称态都是允许的，即可以有两种组合

$$\psi^{\pm}=\psi_{JM\lambda_1\lambda_2}\pm(-1)^J\psi_{JM\lambda_2\lambda_1}. \tag{69.7}$$

这两种态具有确定的电荷宇称 $C$. 电荷共轭运算可以看成自旋变量(螺旋性)反向交换所产生的两个粒子的所有参数(自旋和电荷)完全交换的结果. 第一次运算的结果相当于两个全同粒子系统中的交换. 由此可见,当式(69.7)取"+"号[相当于全同粒子所容许的态 (69.6) ]时, 系统为电荷偶宇称态, 取"−"号时为电荷奇宇称态:

$$\hat{C}\psi^{\pm}=\pm\psi^{\pm}.$$

最后,我们来研究时间反演运算. 自旋为 $s$,其分量为 $\sigma$ 的静止粒子的波函数按照下式变换:

$$\hat{T}\psi_{s\sigma}=(-1)^{s-\sigma}\psi_{s,-\sigma}$$

[参看第三卷(60.2)]. 就其交换性质而言,两个粒子在它们的质心坐标系中的波函数也可以看成角动量为 $J$、分量为 $M$ 的"静止粒子"的波函数. 至于螺旋性 $\lambda_1, \lambda_2$,它们是不改变的:时间反演改变了动量矢量和角动量矢量的符号,因而乘积 $\boldsymbol{j}\cdot\boldsymbol{p}$ 不受影响. 所以,

$$\hat{T}\psi_{JM\lambda_1\lambda_2}=(-1)^{J-M}\psi_{JM\lambda_1\lambda_2}. \qquad (69.8)$$

现在我们可以直接写出螺旋性振幅的对称关系式.

如果相互作用是 $P$-不变的,那么,对于反应

$$a+b\longrightarrow c+d$$

来说,跃迁振幅

$$|\lambda_a\lambda_b\rangle\to|\lambda_c\lambda_d\rangle \quad 和 \quad \hat{P}|\lambda_a\lambda_b\rangle\to\hat{P}|\lambda_c\lambda_d\rangle$$

应该是一样的(对给定的 $J$ 和 $\varepsilon$). 因此,利用式(69.4), 我们求出

$$\langle\lambda_c\lambda_d|S^J|\lambda_a\lambda_b\rangle$$

$$=\frac{\eta_c\eta_d}{\eta_a\eta_b}(-1)^{s_c+s_d-s_a-s_b}\langle-\lambda_c,-\lambda_d|S^J|-\lambda_a,-\lambda_b\rangle. \quad (69.9)$$

如果选择具有一定宇称的态,即选取组合

$$\frac{1}{\sqrt{2}}(\psi_{JM\lambda_1\lambda_2}\pm\hat{P}\psi_{JM\lambda_1\lambda_2})$$

(式中 $\lambda_1\lambda_2=\lambda_a\lambda_b$ 或 $\lambda_c\lambda_d$)而不是具有一定螺旋性的态，那么，宇称不守恒时，跃迁振幅为零.

时间反演使每一个态按照式(69.8)变换，并且使初态和终态交换. 因此，$T$ 不变性引出关系式

$$\langle\lambda_c\lambda_d|S^J(\varepsilon)|\lambda_a\lambda_b\rangle=\langle\lambda_a\lambda_b|S^J(\varepsilon)|\lambda_c\lambda_d\rangle. \qquad (69.10)$$

然而这两个振幅属于不同的过程(反应和逆反应). 只有在弹性散射的情况下，两种过程才是本质上一样的，式(69.10)也才是这种反应的螺旋性振幅之间的关系.

在两个全同粒子的弹性散射中，由于交换对称性，不同振幅的数目进一步减少. 我们看到，当 $J$ 给定后，可能出现的态或者是 $\lambda_1, \lambda_2$ 的完全对称态，或者是 $\lambda_1, \lambda_2$ 的完全反对称态. 因而，角动量守恒还意味着螺旋性的交换对称性必然守恒.

同样的情况也出现在粒子-反粒子的弹性散射中(或者一对粒子-反粒子变成另一对粒子-反粒子，即 $a+\bar{a}\longrightarrow b+\bar{b}$ 类型的反应). 当 $J$ 给定后，既可能出现对 $\lambda_1$，$\lambda_2$ 对称的态，又可能出现对 $\lambda_1, \lambda_2$ 反对称的态. 但是，这两种态所对应的系统的电荷宇称值不同. 由此得出，如果粒子的相互作用是 $C$ 不变的，因而电荷宇称守恒，那么，对 $\lambda_1$，$\lambda_2$ 有不同对称性的态之间的跃迁是禁止的[①]. 不过，我们必须强调一个和全同粒子的情形不同的地方. 在全同粒子的情形中，对于每一个给定的 $J$，不存在只有一种对称性的态. 而在"粒子-反粒子"的情形中，只禁止对称性不同的态之间的跃迁，而这些态本身(对于每一个 $J$ 来说)却是存在的.

因为存在普遍的 $CPT$ 不变性，所以 $T$ 不变性的存在也就意味着存在 $CP$ 不变性. $CP$ 不变性使这样两种反应的振幅相等：其中

① 非全同粒子相互作用的各向同性的不变性也可以产生一个类似的禁阻. 例如，在质子-中子散射中，只要这种不变性成立，那么，对于 $\lambda_1, \lambda_2$ 有不同对称性的态之间的跃迁是禁止的.

一种反应是将另一种反应中的粒子全部换成反粒子（并改变螺旋性的符号），并且 $\lambda_{\bar{a}}=-\lambda_a,\cdots$①：

$$\langle\lambda_c\lambda_d|S^J|\lambda_a\lambda_b\rangle=\langle\lambda_{\bar{c}}\lambda_{\bar{d}}|S^J|\lambda_{\bar{a}}\lambda_{\bar{b}}\rangle, \qquad (69.11)$$

对同一广义反应的所有交叉通道来说，独立振幅的数目是相同的，因此可以由任何一个通道决定这个数．例如，可以用同样数目的独立振幅描述弹性散射 $a+b\longrightarrow a+b$ 和湮没 $a+\bar{a}\longrightarrow b+\bar{b}$．这时，第一种情形下由 $T$ 不变性所加的限制等价于第二种情形下由 $C$ 不变性所加的限制．

我们还要讨论一个粒子衰变成两个粒子的反应：$a\to b+c$．在质心坐标系（即粒子 $a$ 的静止参考系）中，我们有 $\boldsymbol{p}_b=-\boldsymbol{p}_c$．等式 $\boldsymbol{j}_a=\boldsymbol{j}_b+\boldsymbol{j}_c$ 点乘以 $\boldsymbol{p}_b$，我们得到

$$\lambda_a=\lambda_b-\lambda_c \qquad (69.12)$$

（定义粒子 $a$ 的螺旋性 $\lambda_a$ 为其自旋在一个次级粒子动量方向上的分量）．可以说，此式是该过程所具有的附加对称性（对方向 $\boldsymbol{p}_b$ 和 $\boldsymbol{p}_c$ 的轴对称性）的结果．如果粒子 $a$ 的自旋 $s_a$ 小于 $s_b+s_c$，那么式(69.12)将减少所容许的数值组 $\lambda_a,\lambda_b,\lambda_c$ 的数目，从而减少衰变的独立螺旋性振幅的数目．这时，总角动量 $J$ 等于初级粒子的自旋 $s_a$，因而是一个固定值．

衰变时的 $P$ 不变性由下式表达：

$$\langle\lambda_b\lambda_c|S^J|\lambda_a\rangle=\frac{\eta_b\eta_c}{\eta_a}(-1)^{s_a-s_b-s_c}\langle-\lambda_b,-\lambda_c|S^J|-\lambda_a\rangle \qquad (69.13)$$

［在这里，除应用了式(69.4)以外，还应用了单一粒子波函数的变换规则(16.16)］．

如果初级粒子是真中性粒子，那么 $C$ 宇称守恒时还会出现进

① 既然这两个振幅属于不同的反应，它们之间就不会互相干涉；因此，(69.11)中的相因子就没有意义，可以假设它等于1．只有从(69.11)推出的截面公式才有实际意义．

一步的限制. 在这里必须区别三种情形. 如果衰变产物也是真中性粒子,必定有 $C_a=C_bC_c$;这个条件要么完全禁止衰变,要么被满足而不出现新的限制. 如果粒子 $b$ 和 $c$ 完全不同, 那么 $C$ 不变性将在不同过程($a\to b+c$ 和 $a\to\bar{b}+\bar{c}$)的振幅之间建立一种关系. 最后,对于衰变 $a\to b+\bar{b}$ 有一种限制,因为当电荷宇称 $C$ 和总角动量 $J=s_a$ 给定时,系统不是处于螺旋性对称态, 就是处在螺旋性反对称态,依数 $J$ 的奇偶和 $C$ 的符号如何而定.

$CP$ 不变性意味着衰变 $a\to b+c$ 和 $\bar{a}\to\bar{b}+\bar{c}$ 的振幅相等:

$$\langle\lambda_b\lambda_c|S^J|\lambda_a\rangle=\langle\lambda_{\bar{b}}\lambda_{\bar{c}}|S^J|\lambda_{\bar{a}}\rangle \tag{69.14}$$

(式中 $\lambda_{\bar{a}}=-\lambda_a$, …), 即粒子和反粒子的衰变几率相等. 如果粒子的衰变方式不止一种(即通过不同的通道衰变), 此式对每个通道都是适用的. 但是我们着重指出,这个结论是基于 $CP$ 不变性, 而 $CP$ 不变性并非自然界的普适性质, 只有 $CPT$ 不变性才是普适的,这一要求本身只能导致等式

$$\langle\lambda_b\lambda_c|S^J|\lambda_a\rangle=\langle\lambda_{\bar{a}}|S^J|\lambda_{\bar{b}}\lambda_{\bar{c}}\rangle,$$

此式右端是衰变的逆过程. 我们将在 § 71 看到,$CPT$ 不变性条件将和么正性要求一起, 在粒子和反粒子的衰变几率之间仍然会引出某种关系,虽然这种关系受到更多的限制.

## 习　题

1. 利用式(69,6)求双光子系统可能状态的分类.

**解**　在这种情况下, $\lambda_1,\lambda_2=\pm1$. 当 $J$ 为偶数($J>0$)时, 根据(69.6), 允许三个对 $\lambda_1,\lambda_2$ 对称的态:

$a$) $\psi_{JM11}$, $b$) $\psi_{JM-1-1}$, $c$) $\psi_{JM1-1}+\psi_{JM-11}$.

当 $J$ 为奇数(且 $J>1$)时,允许一个反对称态:

$d$) $\psi_{JM1-1}-\psi_{JM-11}$.

态 $c$) 和态 $d$) 也具有确定的宇称($+1$): 按照式(69.4),

$$\hat{P}(\psi_{JM1-1}\pm\psi_{JM-11})=\pm(-1)^J(\psi_{JM1-1}\pm\psi_{JM-11});$$

因子$\pm(-1)^J=1$，因为括号前的"+"对应着$J$的偶数值，而"−"对应着$J$的奇数值．态$a$）和态$b$）没有确定的宇称，但是，可以由它们的组合

$$a')\ \psi_{JM11}+\psi_{JM-1-1},\qquad b')\ \psi_{M11}-\psi_{JM-1-1}$$

得到偶宇称态和奇宇称态．当$J=0$时只允许$\lambda_1=\lambda_2$(根据条件$|\lambda_1-\lambda_2|\leqslant J$)，因而态$c$）不出现，只有一个偶宇称态和一个奇宇称态$a'$）和$b'$）．最后，当$J=1$时，对奇数$J$唯一可能的态$d$）也被禁止，因为这时$\lambda=2>J$．这样一来，我们就得到可允许状态的表(9.5)．

2．在非相对论性近似中，系统的总角动量$J$由自旋$S$和轨道角动量$L$的相加求出．试对二粒子系统求态$|JLSM\rangle$和态$|JM\lambda_1\lambda_2\rangle$之间的联系．

**解** 按照角动量相加时波函数的组成法则，我们有

$$\psi_{JLSM}=\Sigma\{\psi_{s_1\sigma_1}\psi_{s_2\sigma_2}\langle\sigma_1\sigma_2|SM_S\rangle\}\psi_{LM_L}\langle M_LM_S|JM\rangle \tag{1}$$

这里$\psi_{s\sigma}$为自旋$s$(在固定$z$轴上的分量为$\sigma$)的本征函数，$\psi_{LM_L}$是轨道角动量$L$(分量为$M_L$)的本征函数；大括号内的表达式相当于$s_1$加$s_2$给出$S$，然后$S$和$L$相加给出$J$；求和对所有的$m$型指标进行．在动量表象中把所有函数都写成(动量$\boldsymbol{p}\equiv\boldsymbol{p}_1$的)方向$\boldsymbol{n}$的函数，并且利用第三卷(58．7)把函数$\psi_{s\sigma}$通过螺旋性状态的函数$\psi_{n\lambda}$表示出来：

$$\psi_{s_1\sigma_1}=\sum_{\lambda_1}D^{(s_1)}_{\lambda_1\sigma_1}(\boldsymbol{n})\psi_{n\lambda_1},$$

$$\psi_{s_2\sigma_2}=\sum_{\lambda_2}D^{(s_2)}_{-\lambda_2\sigma_2}(\boldsymbol{n})\psi_{n,-\lambda_2}.$$

对于函数$\psi_{LM_L}$，我们有

$$\psi_{LM_L}=Y_{LM_L}(\boldsymbol{n})=i^L\sqrt{\frac{2L+1}{4\pi}}D^{(L)}_{0M_L}(\boldsymbol{n})$$

[这里利用了第三卷的(58.25)和定义(16.5)]．把这些函数代入(1)，且两次使用第三卷中的展开式(110．1)和克莱布许-高登系数的正交性公式(106.13)，就得到$\psi_{JLSM}$的展开式

$$\psi_{JLSM}=\sum_{\lambda_1\lambda_2}\psi_{JM\lambda_1\lambda_2}\langle JM\lambda_1\lambda_2|JLSM\rangle, \tag{2}$$

式中

$$\psi_{JM\lambda_1\lambda_2}=\psi_{n\lambda_1}\psi_{n,-\lambda_2}D^{(J)}_{\Lambda M}(\boldsymbol{n})\sqrt{\frac{2J+1}{4\pi}},\quad \Lambda=\lambda_1-\lambda_2.$$

系数为

$$\langle JM\lambda_1\lambda_2|JLSM\rangle=$$
$$=(-i)^L(-1)^{s_1-s_2+S}\sqrt{(2L+1)(2S+1)}\begin{pmatrix}s_1 & s_2 & S\\ \lambda_1 & -\lambda_2 & -\Lambda\end{pmatrix}\times\begin{pmatrix}L & S & J\\ 0 & \Lambda & -\Lambda\end{pmatrix}. \quad (3)$$

由于变换(2)是么正的，因而我们有

$$\langle JLSM|JM\lambda_1\lambda_2\rangle=\langle JM\lambda_1\lambda_2|JLSM\rangle^*.$$

## §70. 不变振幅

在螺旋性振幅中使用了一个特定的参考系——质心坐标系. 但为了利用协变微扰论计算散射振幅（以及为了研究它们的一般解析性质），把散射振幅写成明显的协变形式是比较方便的.

如果参加反应的粒子没有自旋，那么散射振幅仅仅依赖于四维动量的不变乘积. 对于形如

$$a+b\longrightarrow c+d \quad (70.1)$$

的反应，这些不变量可以是 §66 中所定义的量 $s,t$，$u$ 中的任意两个. 于是，散射振幅化简成一个单一的函数 $M_{fi}=f(s,t)$.

如果粒子具有自旋，那么，除了动力学不变量 $s,t,u$ 外，还应该有由粒子的波动振幅组成的不变量(双旋量，四维张量等). 这时，散射振幅的形式应该是

$$M_{fi}=\sum_n f_n(s,t)F_n, \quad (70.2)$$

式中的 $F_n$ 是与所有参加反应的粒子的波动振幅(以及它们的四维动量)线性相关的不变量. 系数 $f_n(s,t)$ 叫做**不变振幅**.

如果所选的波动振幅与具有一定螺旋性的粒子相对应，就能得到确定的不变量值 $F_n=F_n(\lambda_i,\lambda_f)$. 那么，螺旋性散射振幅就是不变振幅 $f_n$ 的线性齐次组合. 由此可以看到，独立函数 $f_n(s,t)$ 的数目等于独立的螺旋性振幅的数目. 由于独立的螺旋性振幅数容

易确定(如§69中的阐述),不变量 $F_n$(其数目已预先知道)的组成也就容易多了.

我们举几个例子. 在这些例子中, 我们假定相互作用都是 $T$ 不变和 $P$ 不变的. $P$ 不变性意味着不变量 $F_n$ 应该是真标量(而不是赝标量).

**1/2 自旋粒子对零自旋粒子的散射**

为了计算不变量的数目(即独立螺旋性振幅的数目), 我们注意到这时 $S^J$ 矩阵元的总数(即不同的 $\lambda_1, \lambda_2$, $\lambda'_1$, $\lambda'_2$ 的组合数)等于 $4(\lambda_1=\lambda'_1=0, \lambda_2, \lambda'_2=\pm 1/2)$. 考虑到 $P$ 不变性, 独立矩阵元的数目减为 2, 且 $T$ 不变性不会改变这个数目.

两个独立的不变量可以取为

$$F_1=\bar{u}'u, F_2=\bar{u}'(\gamma K)u, \tag{70.3}$$

式中, $u=u(p)$, $u'=u(p')$ 分别为初态费米子和终态费米子的双旋量振幅. $K=k+k'$, $k$ 和 $k'$ 分别为初态玻色子和终态玻色子的四维动量①.

显然, 式(70.3)的两个量是 $T$ 不变量. 这是因为在时间反演下, 乘积 $\bar{u}'u$ 和 $\bar{u}'\gamma^\mu u$ 与算符 $\hat{\bar{\psi}}\hat{\psi}$ 和 $\hat{\bar{\psi}}\gamma^\mu\hat{\psi}$ 的变换规律(28.6) 相同, 且前者是后者的矩阵元: 乘积 $\bar{u}'u$ 本身是不变的, 而四维矢量 $\bar{u}'\gamma u$ 按下式变换:

$$\bar{u}'\gamma^0 u \to \bar{u}'\gamma^0 u, \bar{u}'\boldsymbol{\gamma} u \to -\bar{u}'\boldsymbol{\gamma} u.$$

四维动量也按照类似的方式变换: $(K^0, \boldsymbol{K}) \to (K^0, -\boldsymbol{K})$, 因而, 标量积 $F_2=K_\mu(\bar{u}'\gamma^\mu u)$ 是不变的.

**两个 1/2 自旋的全同粒子的弹性散射**

---

① 乍看起来, 似乎还可以组成如 $\bar{u}'\sigma_{\mu\nu}k^\mu k'^\nu u$ 这样的不变量[矩阵 $\sigma_{\mu\nu}$ 的定义见(28.2)]. 然而, 如果考虑守恒定律 $k'=p+k-p'$ 和双旋量振幅所满足的方程

$$(\gamma p)u=mu, \qquad \bar{u}'(\gamma p')=m\bar{u}',$$

就会发现, 这样的不变量可以化成式(70.3).

为了计算独立的螺旋性振幅数，比较方便的做法是从螺旋性状态的线性组合出发：

$$\psi_{1g}=\psi_{++}+\psi_{--},\ \psi_{2g}=\psi_{++}-\psi_{--},\ \psi_{3g}=\psi_{+-}+\psi_{-+},$$
$$\psi_u=\psi_{+-}-\psi_{-+},$$

式中的下标±指出两个粒子的螺旋性量子数（±1/2）．两个粒子交换时，态 $1g, 2g, 3g$ 不变，而态 $u$ 变号．可见跃迁 $g\leftrightarrow u$ 是禁止的，因而，考虑交换对称性时，还有 $16-6=10$ 个矩阵元．对于反演 $P$，函数 $\psi_{1g}$ 和 $\psi_{3g}$ 的宇称与 $\psi_{2g}$ 的宇称相反，它们之间的跃迁被禁止，这就使独立振幅数减少到 6．最后，$T$ 不变性使跃迁 $1g\to 3g$ 和 $3g\to 1g$ 的振幅相等，所以总共只剩下 5 个独立振幅，可以选 5 个独立的不变量如下：

$$\left.\begin{array}{l} F_1=(\bar{u}'_1 u_1)(\bar{u}'_2 u_2),\quad F_2=(\bar{u}'_1\gamma^5 u_1)(\bar{u}'_2\gamma^5 u_2),\\ F_3=(\bar{u}'_1\gamma^\mu u_1)(\bar{u}'_2\gamma_\mu u_2),\ F_4=(\bar{u}'_1\gamma^\mu\gamma^5 u_1)(\bar{u}'_2\gamma_\mu\gamma^5 u_2),\\ \qquad F_5=(\bar{u}'_1\sigma^{\mu\nu}u_1)(\bar{u}'_2\sigma_{\mu\nu}u_2), \end{array}\right\}\tag{70.4}$$

式中 $u_1, u_2$ 为初态粒子的双旋量振幅，而 $u'_1, u'_2$ 为终态粒子的双旋量振幅．初态（或终态）粒子间的交换不会引出新的不变量：新的不变量可以通过先前的不变量表达（参看 §28 的习题）．但是，表达式(70.2)[其中的 $F_n$ 由 (70.4) 给出]显然没有考虑到两个全同费米子的交换必然要改变散射振幅的符号这个要求．满足这个要求的表达式可以写成

$$M_{fi}=[(\bar{u}'_1 u_1)(\bar{u}'_2 u_2)f_1(t,u)-(\bar{u}'_2 u_1)(\bar{u}'_1 u_2)f_1(u,t)]+\cdots \tag{70.5}$$

当 $p'_1$ 和 $p'_2$（或 $p_1$ 和 $p_2$）交换时，运动学不变量 $s\to s,\ t\to u,\ u\to t$，因而上述要求必然得到满足．

**自旋为 0 或 1/2 的粒子对一个光子的弹性散射**

这类过程的振幅可用满足下列条件的类空的四维单位矢量 $e^{(1)}, e^{(2)}$ 来表达：

$$e^{(1)2}=e^{(2)2}=-1,\ e^{(1)}e^{(2)}=0,$$
$$e^{(1)}k=e^{(2)}k=0,\ e^{(1)}k'=e^{(2)}k'=0. \tag{70.6}$$

(这两个四维矢量都可以作为四维单位矢量，用以对初态光子或终态光子的极化性质作不变性描述——参看§8).

设 $k$ 和 $k'$ 分别为光子的初态和终态的四维动量，而 $p$ 和 $p'$ 分别为散射粒子的初态和终态的四维动量. 我们来研究四维矢量

$$\left.\begin{aligned}P^{\lambda}&=p^{\lambda}+p'^{\lambda}-K^{\lambda}\frac{pK+p'K}{K^2},\\ N^{\lambda}&=e^{\lambda\mu\nu\rho}P_{\mu}q_{\nu}K_{\rho},\end{aligned}\right\} \tag{70.7}$$

式中

$$K=k+k',\ q=p-p'=k'-k.$$

它们显然是互相正交的，并且也与四维矢量 $K,q$ 正交，因而还与 $k,k'$ 正交. 既然它们与类时的四维矢量 $K$ 正交 $(K^2=2kk'>0)$，它们自身必定是类空的(实际上，在 $\mathbf{K}=0$ 的参考系中，由 $KP=0$ 可以得出 $P_0=0$，因而 $P^2<0$). 令

$$e^{(1)\lambda}=\frac{N^{\lambda}}{\sqrt{-N^2}},\ e^{(2)\lambda}=\frac{p^{\lambda}}{\sqrt{-p^2}}, \tag{70.8}$$

将 $P$ 和 $N$ 归一化，我们便得到具有所需各种性质的一对四维矢量. 可以看到，$e^{(2)}$ 是真矢量，$e^{(1)}$ 是赝矢量.

借助初态光子和终态光子的四维极化矢量 $e$ 和 $e'$，光子的散射振幅可以写成

$$\mathcal{M}_{fi}=F^{\lambda\mu}e'^*_{\lambda}e_{\mu}. \tag{70.9}$$

光子的螺旋性只能取两个值(±1)，因而在一个零自旋粒子对一个光子的散射中，独立的螺旋性振幅数等于2，这与零自旋粒子和1/2自旋粒子的相互散射一样. 式(70.9)中的张量 $F^{\lambda\mu}$ 仅仅由粒子的四维动量组成，可以写成如下形式：

$$F^{\lambda\mu}=f_1e^{(1)\lambda}e^{(1)\mu}+f_2e^{(2)\lambda}e^{(2)\mu}, \tag{70.10}$$

式中的 $f_1,f_2$ 为不变振幅. 应该指出，$F^{\lambda\mu}$ 中没有包含乘积 $e^{(1)\lambda}e^{(2)\mu}$

的项，因为这个乘积是赝张量，当代入式（70.9）中时将得到赝标量.

最后我们来研究一个 1/2 自旋粒子对一个光子的散射. 为了计算独立的螺旋性振幅数，我们看到，在这种情况下，$S^J$ 矩阵元的总数为 16(两个初态 粒子和两个终态粒子中的每一个都可有两个螺旋性的值). $P$ 不变性要求使这个数减少到 8. 最后，$T$ 不变性要求又使它减少到 6.

在这种情况下，张量 $F_{\lambda\mu}$ 可以写成

$$F_{\lambda\mu}=G_0(e_\lambda^{(1)}e_\mu^{(1)}+e_\lambda^{(2)}e_\mu^{(2)})+G_1(e_\lambda^{(1)}e_\mu^{(2)}+e_\lambda^{(2)}e_\mu^{(1)})+$$
$$+G_2(e_\lambda^{(1)}e_\mu^{(2)}-e_\lambda^{(2)}e_\mu^{(1)})+G_3(e_\lambda^{(1)}e_\mu^{(1)}-e_\lambda^{(2)}e_\mu^{(2)}), \qquad (70.11)$$

式中的 $G_0, G_3$ 为真标量，$G_1, G_2$ 为赝标量，这四个量都是费米子双旋量振幅 $\bar{u}(p')$ 和 $u(p)$ 的双线性式，即形式为

$$G_n=\bar{u}(p')Q_nu(p). \qquad (70.12)$$

矩阵 $Q_n$ 的一般形式(在双旋量指标方面)为

$$\left.\begin{aligned}Q_0=f_1+f_2(\gamma K),\quad Q_1=\gamma^5[f_3+f_4(\gamma K)],\\ Q_2=\gamma^5[f_5+f_6(\gamma K)],\quad Q_3=f_7+f_8(\gamma K),\end{aligned}\right\} \qquad (70.13)$$

式中 $K=k+k'$. 系数 $f_1,\cdots,f_8$ 为不变振幅，在这里是 8 个(而不是 6 个)，因为还没有考虑 $T$ 不变性要求.

时间反演交换粒子的初、终态四维动量，也改变它们的空间分量的符号：

$$(k_0, \boldsymbol{k})\leftrightarrow(k_0', -\boldsymbol{k}'),\quad (p_0, \boldsymbol{p})\leftrightarrow(p_0', -\boldsymbol{p}). \qquad (70.14)$$

光子的四维极化矢量按下式变换：

$$(e_0, \boldsymbol{e})\leftrightarrow(e_0'^*, -\boldsymbol{e}'^*) \qquad (70.15)$$

[比较(8.11a)]，因而

$$(e_0'^*e_0, e_i'^*e_0, e_i'^*e_k)\longrightarrow(e_0'^*e_0, -e_0'^*e_i, e_k'^*e_i).$$

由于这最后一个变换，散射振幅(70.9)的不变性条件等价于

$$(F_{00}, F_{i0}, F_{ik})\longrightarrow(F_{00}, -F_{0i}, F_{ki}).$$

另一方面，由于代换(70.14)，我们有

$$(K_0, \boldsymbol{K}) \to (K_0, -\boldsymbol{K}),\quad (q_0, \boldsymbol{q}) \to (-q_0, \boldsymbol{q}),$$
$$(P_0, \boldsymbol{P}) \to (P_0, -\boldsymbol{P}),\quad (N_0, \boldsymbol{N}) \to (N_0, -\boldsymbol{N}),$$

以致

$$(e_0^{(1,2)}, \boldsymbol{e}^{(1,2)}) \to (e_0^{(1,2)}, -\boldsymbol{e}^{(1,2)}). \tag{70.16}$$

因而，从表达式(70.11)出发，我们必定有

$$G_{0,1,3} \to G_{0,1,3},\quad G_2 \to -G_2.$$

但在时间反演下，

$$\bar{u}'\gamma^5 u \to -\bar{u}'\gamma^5 u,\quad \bar{u}'\gamma^5(\gamma K)u \to \bar{u}'\gamma^5(\gamma K)u,$$

从赝标量和赝矢量双线性式的变换规则(28.6)来看，这也是很明显的。由表达式(70.12)和(70.13)可见，由于散射振幅的$T$不变性，必定有

$$f_3 = f_6 = 0. \tag{70.17}$$

## §71. 幺正性条件

散射矩阵应该是幺正的：$\hat{S}\hat{S}^+ = 1$，或用矩阵元表达为：

$$(SS^+)_{fi} = \sum_n S_{fn} S_{in}^* = \delta_{fi} \tag{71.1}$$

式中的$n$表示一切可能的中间态①。这是$S$矩阵的最一般的性质，它保证了状态的归一性和正交性在反应中得以保持(比较第三卷§125，§144)。特别是，等式(71.1)的对角元只不过表达这样一个事实：由已知初态到一切终态的跃迁几率之和等于1，即

$$\sum_n |S_{ni}|^2 = 1.$$

---

① 当然，(71,1)中$\delta_{fi}$的实际意义与量子数的具体选择和系统波函数的归一化有关。它的定义应该使

$$\sum_f \delta_{if} = 1.$$

将形如(64.2)的矩阵元代入(71.1)，我们得到

$$T_{fi}-T^*_{if}=\mathrm{i}(2\pi)^4\sum_n \delta^{(4)}(P_f-P_n)T_{fn}T^*_{in}$$

$$=\mathrm{i}(2\pi)^4\sum_n \delta^{(4)}(P_f-P_n)T^*_{nf}T_{ni} \qquad (71.2)$$

我们在等式右端写出两种等价的形式，这是由于把么正性条件分别写成 $\hat{S}\hat{S}^+=1$ 或 $\hat{S}^+\hat{S}=1$(即交换 $\hat{S}$ 和 $\hat{S}^+$的次序)而得出的．我们看到，这个等式的左端是 $T$ 的矩阵元的一次式，而右端是二次式．因此，如果相互作用(譬如说，电磁相互作用）包含一个小参数，那么左端将是一级小量，而右端是二级小量．在一级近似中，后者可以略去，因而有

$$T_{fi}=T^*_{if}, \qquad (71.3)$$

即矩阵 $T$ 是厄密的．

为了赋予么正性条件(71.2)以更具体的形式，必须明确对 $n$ 求和指的是什么．让我们就两个粒子的碰撞来研究这个问题，并且假定守恒定律只容许弹性散射．这时，式(71.2) 中的所有中间态也都是“二粒子”态．对它们的求和意味着对中间动量 $\boldsymbol{p}_1''$, $\boldsymbol{p}_2''$ 积分，并对两个粒子的自旋量子数(例如螺旋性)$\lambda''$ 求和：

$$\sum_n \to \int \frac{V^2 \mathrm{d}^3 p_1'' \mathrm{d}^3 p_2''}{(2\pi)^6}\sum_{\lambda''}.$$

用 §64 中那样的方法消去 $\delta$ 函数，便得到“二粒子的”么正性条件为

$$T_{fi}-T^*_{if}=\frac{\mathrm{i}V^2}{(2\pi)^2}\sum_{\lambda''}\frac{|\boldsymbol{p}|}{\varepsilon}\int T_{fn}T^*_{in}\varepsilon_1''\varepsilon_2''\mathrm{d}o'',$$

式中的 $\boldsymbol{p}$ 和 $\varepsilon$ 分别为质心坐标系中的动量和总能量．根据式(64.10)将振幅 $T_{fi}$ 换成 $M_{fi}$ 后，便可消去归一化体积：

$$M_{fi}-M^*_{if}=\frac{\mathrm{i}}{(4\pi)^2}\sum_{\lambda''}\frac{|\boldsymbol{p}|}{\varepsilon}\int M_{fn}M^*_{in}\mathrm{d}o''. \qquad (71.4)$$

我们这样定义弹性散射振幅，使得

$$d\sigma=|\langle \boldsymbol{n}'\lambda'|f|\boldsymbol{n}\lambda\rangle|^2 do', \tag{71.5}$$

$\boldsymbol{n},\boldsymbol{n}'$ 分别为初态和终态动量的方向；$\lambda,\lambda'$ 分别为初态和终态的自旋量子数．与(64.19)比较，就可看出

$$\langle \boldsymbol{n}'\lambda'|f|\boldsymbol{n}\lambda\rangle=\frac{1}{8\pi\varepsilon}M_{fi}, \tag{71.6}$$

而么正性条件(71.4)变成

$$\langle \boldsymbol{n}'\lambda'|f|\boldsymbol{n}\lambda\rangle-\langle \boldsymbol{n}\lambda|f|\boldsymbol{n}'\lambda'\rangle^*$$

$$=\frac{i|\boldsymbol{p}|}{2\pi}\sum_{\lambda''}\int\langle \boldsymbol{n}'\lambda'|f|\boldsymbol{n}''\lambda''\rangle\langle \boldsymbol{n}\lambda|f|\boldsymbol{n}''\lambda''\rangle^* do'', \tag{71.7}$$

此式是非相对论性理论中的常用公式[第三卷(125.8)]的推广].

零角度弹性散射的振幅是对角矩阵元 $T_{ii}$. 在这个矩阵元中，粒子的终态和初态是一样的①. 对这个振幅，么正性条件(71.2)取如下形式：

$$2\,\mathrm{Im}T_{ii}=(2\pi)^4\sum_n|T_{in}|^2\delta^{(4)}(P_i-P_n). \tag{71.8}$$

此式右端与初态 $i$ 给定的一切可能的散射过程的总截面（我们记作 $\sigma_t$）只差一个因子．事实上，几率(64.5)对态 $f$ 求和并除以流密度 $j$，便得到

$$\sigma_t=\frac{(2\pi)^4 V}{j}\sum_n|T_{in}|^2\delta^{(4)}(P_i-P_n),$$

因而

$$\frac{2V}{j}\mathrm{Im}T_{ii}=\sigma_t.$$

令 $T_{ii}=M_{ii}/(2\varepsilon_1 V\cdot 2\varepsilon_2 V)$（$\varepsilon_1$，$\varepsilon_2$ 为粒子在质心坐标系中的能

---

① 应该强调指出，我们所说的正是 $T$ 的矩阵元，而不是 $S$ 的矩阵元，即从 $S$ 中减去单位矩阵以后的对角元素.

量)，并将(64.17)的 $j$ 代入，就消去了归一化体积，而有

$$\operatorname{Im} M_{ii}=2|\boldsymbol{p}|\varepsilon\sigma_t. \tag{71.9}$$

这个公式就是所谓的**光学定理**. 如果引入弹性散射振幅 (71.6)，便得到光学定理的一般形式:

$$\operatorname{Im}\langle n\lambda|f|n\lambda\rangle=\frac{|\boldsymbol{p}|}{4\pi}\sigma_t \tag{71.10}$$

[比较第三卷(142.10)].

如果 $S$ 矩阵是在动量表象中给出的 (分波振幅)，那么，由于它对 $J$ 是对角化的，么正性条件可以对每一个 $J$ 值单独写出.

例如，若只有弹性散射是可能的，么正性条件可以写成如下形式:

$$\sum_{\lambda''}\langle\lambda'|S^J|\lambda''\rangle\langle\lambda|S^J|\lambda''\rangle^*=\delta_{\lambda\lambda'}. \tag{71.11}$$

由于 $T$ 不变性，弹性散射矩阵是对称的[比较(69.10)]，因而可以化成对角形式. 这时，么正性条件要求对角元素的模等于 1，因而一般可以写成

$$S_n^J=\exp(2\mathrm{i}\delta_{Jn}), \tag{71.12}$$

式中，$\delta_{Jn}$ 为实常数，是能量的函数(指标 $n$ 标志一给定 $J$ 的对角元素). 在一般情况下，当独立振幅数 $N$ 超过(平方) 矩阵 $S^J$ 的阶数时，使 $S^J$ 对角化的变换系数由 $J$ 和 $E$ 决定 (这些系数不仅包括矩阵的主值，而且还包括与原始的 $N$ 个量等价的独立量). 然而，如果 $N$ 等于矩阵 $S^J$ 的阶数(因而等于矩阵主值的数目)，则对角化系数是普适常数. 这时，对角化状态具有确定的宇称(当然，没有确定的螺旋性).

用分波振幅 $\langle\lambda'|f^J|\lambda\rangle$ 表达时，条件(71.11)的形式为

$$\langle\lambda'|f^J|\lambda\rangle-\langle\lambda|f^J|\lambda'\rangle^*=2\mathrm{i}|\boldsymbol{p}|\sum_{\lambda''}\langle\lambda'|f^J|\lambda''\rangle\langle\lambda|f^J|\lambda''\rangle^*. \tag{71.13}$$

只要把展开式(68.13)代入(71.7)，并考虑到$D$函数的正交归一性，就不难证明这一点．如果存在$T$不变性，矩阵$\langle\lambda'|f^J|\lambda\rangle$是对称的，式(71.13)变成

$$\mathrm{Im}\langle\lambda'|f^J|\lambda\rangle=|\boldsymbol{p}|\langle\lambda'|f^Jf^{J+}|\lambda\rangle. \tag{71.14}$$

如果这个矩阵被对角化，它的对角元素就是

$$f_n^J=\frac{1}{2\mathrm{i}|\boldsymbol{p}|}[\exp(2\mathrm{i}\delta_{Jn})-1]=\frac{1}{|\boldsymbol{p}|}\exp(\mathrm{i}\delta_{Jn})\sin\delta_{Jn}. \tag{71.15}$$

最后，我们给出一些由么正性条件和$CPT$不变性得到的结论．$CPT$不变性给出：

$$T_{fi}=T_{\bar{i}\bar{f}}, \tag{71.16}$$

式中，状态$\bar{i}$和$\bar{f}$与状态$i$和$f$的区别在于全部粒子换成了它们的反粒子（且在动量不变条件下角动量矢量改变符号）．特别是，对于对角元素，

$$T_{ii}=T_{\bar{i}\bar{i}}.$$

因此，由式(71.8)和(71.9)得出，对于粒子之间和反粒子之间的反应，初态给定的所有可能过程的总截面都是相同的．

特别是，粒子和反粒子的总衰变几率（即寿命）相同．这些结果连同粒子和反粒子质量的相等(§11)，是由相互作用的$CPT$不变性得出的最重要的结果．我们知道(参看§69末)，对每一可能的衰变通道单独而言，这样的结论要成立，还要求遵守$CP$不变性．

## 习　题

根据么正性条件，求核子光致$\pi$介子($\gamma+\mathrm{N}\to\pi+\mathrm{N}$)的分波振幅与核子-$\pi$介子弹性散射($\pi+\mathrm{N}\longrightarrow\pi+\mathrm{N}$)的相位之间的关系．这时请注意：$\pi\mathrm{N}$散射属于强相互作用，而光致作用和$\gamma\mathrm{N}$散射属于电磁相互作用．

**解**　分波振幅可以表示如下：

$$\langle\pi\mathrm{N}|S|\gamma\mathrm{N}\rangle=S_{\pi\gamma},$$

$$\langle\gamma N|S|\gamma N\rangle=S_{\gamma\gamma},$$
$$\langle\pi N|S|\pi N\rangle=S_{\pi\pi}$$

(略去了 $J$ 指标和螺旋性指标). 光致作用是电荷 $e$ 的第一级过程,$\gamma N$ 散射为第二级过程; 因而 $S^1_{\pi\gamma}\sim e$, $S_{\gamma\gamma}-1\sim e^2$. 振幅 $S_{\pi\pi}$ 不含小量. 精确到 $e$ 项,条件(71,1)给出

$$S_{\pi\gamma}S^*_{\gamma\gamma}+S_{\pi\pi}S^*_{\gamma\pi}\approx S_{\pi\gamma}+S_{\pi\pi}S^*_{\gamma\pi}=0, \tag{1}$$

$$S_{\pi\gamma}S^*_{\pi\gamma}+S_{\pi\pi}S^*_{\pi\pi}\approx S_{\pi\pi}S^*_{\pi\pi}=1. \tag{2}$$

[等式(2)右端的 1 表示自旋变量的单位矩阵]. 由于 $T$ 不变性, 矩阵 $S_{\pi\pi}$ 是对称的,且 $S_{\gamma\pi}=S_{\pi\gamma}$. 我们取矩阵 $S_{\pi\pi}$ 的对角形式,即对应于具有确定宇称的 $\pi$ 介子态. 这时由(2)可以得出,对角元素的形式为 $e^{2i\delta_\pi}$(具有不同的常数 $\delta_\pi$). 那么,对于矩阵 $S_{\pi\gamma}$ 的每一个元素,(1)给出

$$\frac{S_{\pi\gamma}}{S^*_{\pi\gamma}}=-e^{2i\delta}\pi,$$

由此得出

$$S_{\pi\gamma}=\pm|S_{\pi\gamma}|ie^{i\delta_\pi}.$$

所以,在一个具有确定宇称的态中,光致作用的分波振幅相位由πN弹性散射的相位决定.

# 第八章　协变微扰论

## § 72. 编时乘积

如果粒子间的相互作用可以看作小量，那么，粒子碰撞时所发生的各种过程的几率就可以用微扰论来计算. 不过，非相对论量子力学中的微扰论形式有一个明显的不足之处：没有直接显现出相对论不变性. 虽然将这种理论形式应用到相对论性问题时，最终结果满足相对论不变性条件，但由于中间公式不是协变形式，使得计算十分复杂. 在这一章，我们将阐述一种摆脱上述缺点的由费曼建立的始终一致的相对论性微扰论（R. P. Feynman, 1948—1949）.

在系统的二次量子化描述中，我们用$\Phi$表示在自由粒子各种状态的占有数“空间”中系统的波函数. 系统的哈密顿算符$\hat{H}=\hat{H}_0+\hat{V}$，$\hat{V}$为相互作用算符. 令$\Phi_n$为非微扰哈密顿算符的本征函数，每一个本征函数相应于所有占有数的某些确定值. 任一函数$\Phi$可以展开成$\Phi=\sum_n C_n\Phi_n$. 因而，精确的波动方程

$$i\frac{\partial\Phi}{\partial t}=(\hat{H}_0+\hat{V})\Phi \tag{72.1}$$

变成系数$C_n$的方程组：

$$i\dot{C}_n=\sum_m V_{nm}e^{i(E_n-E_m)t}C_m, \tag{72.2}$$

式中$V_{nm}$为算符$\hat{V}$的与时间无关的矩阵元，$E_n$为非微扰系统的能级（比较第三卷 § 40）.

按照定义，算符 $\hat{V}$ 不显含时间. 另一方面，量

$$V_{nm}(t)=V_{nm}e^{i(E_n-E_m)t} \tag{72.3}$$

可以看成与时间有关的算符

$$\hat{V}(t)=\exp(i\hat{H}_0t)\hat{V}\exp(-i\hat{H}_0t) \tag{72.4}$$

的矩阵元. 我们把 $\hat{V}(t)$ 称为**相互作用表象**中的算符，以区别于原来的与时间无关的薛定谔算符 $\hat{V}$①. 我们用同一字母 $\Phi$ 代表这个新表象中的波函数，就可以将方程(72.2)在符号上写成

$$i\dot{\Phi}=\hat{V}(t)\Phi. \tag{72.5}$$

在这个表象中，波函数的变化是完全由于微扰的作用，即对应着由粒子的相互作用引起的过程.

如果 $\Phi(t)$ 和 $\Phi(t+\delta t)$ 是两个相继时刻的 $\Phi$ 值，那么，方程(72.5)表明:

$$\begin{aligned}\Phi(t+\delta t)&=[1-i\delta t\cdot\hat{V}(t)]\Phi(t)\\&=\exp[-i\delta t\cdot\hat{V}(t)]\Phi(t).\end{aligned}$$

从而任一时刻 $t_f$ 的 $\Phi$ 值可以用某一初始时刻 $t_i(t_f>t_i)$ 的 $\Phi$ 值表示出来:

$$\Phi(t_f)=\left\{\prod_i^f\exp[-i\delta t_\alpha\cdot\hat{V}(t_\alpha)]\right\}\Phi(t_i). \tag{72.6}$$

式中乘积 $\Pi$ 是对 $t_i$ 和 $t_f$ 之间所有无穷小间隔 $\delta t_\alpha$ 求积的极限. 如果 $V(t)$ 是一个普通函数，这个极限就简化为

$$\exp\left(-i\int_{t_i}^{t_f}V(t)dt\right).$$

不过这个结果能否成立，要看由式(72.6)的乘积变为指数上的求

① 应该强调的一点是，定义(72.4)中的 $\hat{H}_0$ 是非微扰的哈密顿算符，这一点与算符的海森堡表象不同. 在海森伯表象中，

$$V^H(t)=\exp(i\hat{H}t)\hat{V}\exp(-i\hat{H}t)$$

(参看第三卷 §13 和本书后面的 §102).

和时，属于不同时刻的因子之间是否对易．算符 $\hat{V}(t)$ 没有这样的对易性，因而不能化成通常的积分．

我们可以把式(72.6)写成符号形式：

$$\Phi(t_f)=T\exp\left\{-\mathrm{i}\int_{t_i}^{t_f}\hat{V}(t)\mathrm{d}t\right\}\Phi(t_i) \tag{72.7}$$

式中的 $T$ 为编时符号，它表示乘积 (72.6) 的各相继因子的一定("编时的")时间顺序．特别是，当 $t_i\to-\infty$，$t_f\to+\infty$ 时，我们有

$$\Phi(+\infty)=\hat{S}\Phi(-\infty), \tag{72.8}$$

式中

$$\hat{S}=T\exp\left\{-\mathrm{i}\int_{-\infty}^{+\infty}\hat{V}(t)\mathrm{d}t\right\}. \tag{72.9}$$

式(72.7)—(72.9)是波动方程形式上的精确解．这种写法的意义在于，我们能很容易地得出微扰的幂级数

$$\hat{S}=\sum_{k=0}^{\infty}\frac{(-\mathrm{i})^k}{k!}\int_{-\infty}^{\infty}\mathrm{d}t_1\int_{-\infty}^{\infty}\mathrm{d}t_2\cdots\int_{-\infty}^{\infty}\mathrm{d}t_k\cdot T\{\hat{V}(t_1)\hat{V}(t_2)\cdots\hat{V}(t_k)\}. \tag{72.10}$$

在这里，每一项中积分的第 $k$ 次幂可以写成 $k$ 重积分，符号 $T$ 表示在变量 $t_1, t_2, \cdots, t_k$ 的每个值域中，相应的算符按照从右到左 $t$ 值增长的编时次序排列①．

由定义(72.8)可见，如果系统在碰撞前处于态 $\Phi_i$(自由粒子的某种集合)，那么它跃迁到态 $\Phi_f$(自由粒子的另一种集合) 的几率振幅为矩阵元 $S_{fi}$．于是，这些矩阵元组成 $S$ 矩阵．

在 § 43 中已经给出了电磁相互作用算符：

$$\hat{V}=e\int(\hat{j}\hat{A})\mathrm{d}^3x. \tag{72.11}$$

将它代入式(72.9)，我们得到

① 戴逊利用展开式(72.10)导出了相对论性微扰论的规则 (F. J. Dyson, 1949).

$$\hat{S}=T\exp\left\{-\mathrm{i}e\int(\hat{j}\hat{A})\mathrm{d}^4x\right\}. \tag{72.12}$$

值得注意的是,算符(72.12)是相对论不变的. 这是因为被积函数是标量,对 $\mathrm{d}^4x$ 的积分是不变的,且编时运算也是不变的. 不过,对最后一点,需要作进一步的说明.

我们知道,只要 $t_1$ 和 $t_2$ 两个时刻所对应的世界点 $x_1$ 和 $x_2$ 是被类时间隔分开的: $(x_2-x_1)^2>0$, 那么这两个时刻的先后顺序(即差 $t_2-t_1$ 的符号)与参考系的选择无关. 在这种情况下,编时顺序必定是不变的. 如果 $(x_2-x_1)^2<0$ (类空间隔) 那么,在不同的参考系中,既可以有 $t_2>t_1$, 也可以有 $t_2<t_1$①. 但是,这样的两个点所对应的事件之间不可能有因果关系. 因而, 与这两个点相关的两个物理量的算符显然是可对易的. 这是因为从物理的观点来讲, 两个算符的不对易性意味着相应的两个量不可能同时被测量,而这是以两个测量之间存在物理联系为必要条件的. 这样一来,上面所说的乘积的时序仍然是不变的: 虽然洛伦兹变换可能颠倒两个时刻的顺序,但由于两个因子是可对易的,因而它们能够恢复到编时顺序②.

不难看出, 本节所给的 $S$ 矩阵的定义必定满足么正性条件. 把 $\hat{S}$ 写成(72.6)那样的编时乘积,再运用 $\hat{V}$ 的厄密性, 我们就可

---

① 为简单起见,我们常常说光锥以内和光锥以外的区域,而不说类时间隔和类空间隔: 距 $x'$ 点的间隔 $(x-x')^2>0$ 的所有点 $x$ 都在以 $x'$ 为顶点的双光锥以内,而间隔 $(x-x')^2<0$ 的所有点都在这个光锥以外.

② 对这一说法需要补充一点,以避免将它应用于乘积 $\hat{V}(t_1)\hat{V}(t_2)\cdots$ 时发生误解. 既然算符 $\hat{V}$ 本身不具有规范不变性(随 $\hat{A}$ 而变),那么因子 $\hat{V}(t_1)$, $\hat{V}(t_2)\cdots$ 虽然在势的一种规范中是对易的,但在另一种规范中就可能不对易. 因而,上面的说法必须表述为: 可以这样来选择势的一种规范,使 $\hat{V}(t_1)$ 和 $\hat{V}(t_2)$ 在光锥之外是可对易的. 显然,这一保留的说法不会影响 $S$ 矩阵的协变性; 散射振幅是实际的物理量,它和势的规范无关(这种独立性在形式上来自 § 43 所讲的作用量积分的规范不变性).

求得：$\hat{S}^+$可以表达成类似因子 $\exp[i\delta t_\alpha \cdot \hat{V}(t_\alpha)]$的乘积（指数上的符号相反），在编时顺序上是相反的．所以，当 $\hat{S}$ 和 $\hat{S}^+$相乘时，所有因子就成对地相消．

应当指出，此时算符 $\hat{S}$ 的幺正性由哈密顿算符的厄密性保证．实际上，与这里所述的理论赖以建立的基本假定相比，幺正性条件更具有普遍性．甚至在不用哈密顿算符和波函数概念的量子力学描写中它也应该满足．

## § 73. 电子散射的费曼图

我们用几个具体例子来说明怎样计算散射矩阵元．这些例子将有助于对协变性微扰论的一般规则进一步公式化．

流算符 $\hat{j}$ 包含两个电子的 $\psi$ 算符之积．因此，在一级微扰论中可能发生的过程的初态和终态只有三个粒子参加：两个电子（算符 $\hat{j}$）和一个光子（算符 $\hat{A}$）．但是不难看出，自由粒子之间不可能发生这样的过程．

这样的过程是能量和动量守恒定律所禁止的．设 $p_1$ 和 $p_2$ 为电子的四维动量，$k$ 为光子的四维动量，则四维动量守恒可以表示为 $k=p_2-p_1$ 或 $k=p_2+p_1$．但是，这样的等式是不可能的，因为对一个光子来说，$k^2=0$，而$(p_2\pm p_1)^2$ 肯定不等于零．如果我们在其中一个电子为静止的参考系中计算不变量$(p_2\pm p_1)^2$ 之值，可以得到

$$(p_2\pm p_1)^2=2(m^2\pm p_1p_2)=2(m^2\pm \varepsilon_1\varepsilon_2\mp \mathbf{p}_1\cdot \mathbf{p}_2)=2m(m\pm \varepsilon_2).$$

而且由于 $\varepsilon_2>m$，于是有

$$(p_2+p_1)^2>0,\quad (p_2-p_1)^2<0. \tag{73.1}$$

因此，第一个非零的（非对角的）$S$ 矩阵元只能出现在二级微扰论中．所有的相关过程都包含在表达式(72.12) 展开时得到的二级算符中：

$$\hat{S}^{(2)}=-\frac{e^2}{2!}\iint d^4x d^4x'\cdot T[\hat{j}^{\mu}(x)\hat{A}_{\mu}(x)\hat{j}^{\nu}(x')\hat{A}_{\nu}(x')].$$

由于电子和光子算符互相对易，这里的 $T$ 乘积可以分成两个：

$$\hat{S}^{(2)}=-\frac{e^2}{2}!\iint d^4x d^4x'\cdot T[\hat{j}^{\mu}(x)\hat{j}^{\nu}(x')]T[\hat{A}_{\mu}(x)\hat{A}_{\nu}(x')]. \tag{73.2}$$

作为第一个例子，我们来研究两个电子的弹性散射. 初态中两个电子的四维动量为 $p_1$ 和 $p_2$，终态中两个电子的四维动量为 $p_3$ 和 $p_4$. 还假设所有电子都处于一定的自旋态. 为简单起见，自旋变量的指标一律略去.

由于初态和终态没有光子，因此，所要求的光子算符 $T$ 乘积的矩阵元是对角元素 $\langle 0|\cdots|0\rangle$，这里 $|0\rangle$ 代表光子真空态. $T$ 乘积对真空态的平均值(对每对指标 $\mu,\nu$ 来说)是两个点 $x$ 和 $x'$ 的坐标的确定函数. 由于四维空间是均匀的，因而坐标只能以差 $x-x'$ 的形式出现. 张量

$$D_{\mu\nu}(x-x')=i\langle 0|TA_{\mu}(x)A_{\nu}(x')|0\rangle \tag{73.3}$$

叫做**光子传播函数**(或**光子传播子**)，我们将在§76中具体计算它.

对于电子算符的 $T$ 乘积，我们需要计算矩阵元

$$\langle 34|Tj^{\mu}(x)j^{\nu}(x')|12\rangle, \tag{73.4}$$

式中的符号 $|12\rangle$，$|34\rangle$ 表示具有相应动量的电子对的态. 这个矩阵元也可以利用明显的等式

$$\langle 2|F|1\rangle=\langle 0|a_2 F a_1^{+}|0\rangle$$

表示成对真空态求平均，式中的 $\hat{F}$ 为任意算符，$\hat{a}_1^{+}$ 和 $\hat{a}_2$ 分别为第一个电子的产生算符和第二个电子的湮灭算符. 于是，代替式(73.4)，我们可以计算量

$$\langle 0|a_3 a_4 T[j^{\mu}(x)j^{\nu}(x')]a_2^{+}a_1^{+}|0\rangle, \tag{73.5}$$

指标 1, 2, …是 $p_1, p_2, \cdots$ 的简写.

两个流算符中的每一个都是一个乘积 $\hat{j}=\hat{\bar{\psi}}\gamma\hat{\psi}$，而每一个 $\psi$ 算符是一个和

$$\hat{\psi}=\sum_{p}(\hat{a}_p\psi_p+\hat{b}_p^+\psi_{-p}),\quad \hat{\bar{\psi}}=\sum_{p}(\hat{a}_p^+\bar{\psi}_p+\hat{b}_p\bar{\psi}_{-p}) \tag{73.6}$$

(两式的第二项都包含正电子的算符，在现在的问题中它们“不作用”)．于是，乘积 $\hat{j}^\mu(x)\hat{j}^\nu(x')$ 可写成一些项的和，其中每项都包含两个 $\hat{a}_p$ 算符和两个 $\hat{a}_p^+$ 算符的乘积．这些算符应能保证湮灭电子 1, 2 并产生电子 3, 4．即它们必定是算符 $\hat{a}_1, \hat{a}_2, \hat{a}_3^+, \hat{a}_4^+$．这些算符可以与式(73.5)中的“外”算符 $\hat{a}_1^+, \hat{a}_2^+, \hat{a}_3, \hat{a}_4$ 收缩且按等式

$$\langle 0|a_p a_p^+|0\rangle=1 \tag{73.7}$$

约去．由于 $\hat{a}_1, \hat{a}_2, \hat{a}_3^+, \hat{a}_4^+$ 是由 $\psi$ 算符中来的，所以，式(73.5)中有四项：

$$(73,5)=a_3a_4(\bar{\psi}\gamma^\mu\psi)(\bar{\psi}'\gamma^\nu\psi')a_2^+a_1^+ + a_3a_4(\bar{\psi}\gamma^\mu\psi)(\bar{\psi}'\gamma^\nu\psi')a_2^+a_1^+ +$$
$$+a_3a_4(\bar{\psi}\gamma^\mu\psi)(\bar{\psi}'\gamma^\nu\psi')a_2^+a_1^+ + a_3a_4(\bar{\psi}\gamma^\mu\psi)(\bar{\psi}'\gamma^\nu\psi')a_2^+a_1^+, \tag{73,8}$$

式中 $\psi=\psi(x)$，$\psi'=\psi(x')$，用括号连接收缩的算符，即：这些算符中的一对 $\hat{a}, \hat{a}^+$ 按照(73.7)约去．在式(73.8)的每一项中，只要连续交换算符 $\hat{a}_1$、$\hat{a}_2$、…的位置，就能使共轭算符两两靠拢($\hat{a}_1\hat{a}_1^+$等)，于是，它们的乘积的平均值就等于(73.7)的平均值的乘积．考虑到这些算符都是反对易的(1, 2, 3, 4 是不同的态！)①，我们求出矩阵元(73.4)为

$$\langle 34|Tj^\mu(x)j^\nu(x')|12\rangle=(\bar{\psi}_4\gamma^\mu\psi_2)(\bar{\psi}'_3\gamma^\nu\psi'_1)$$
$$+(\bar{\psi}_3\gamma^\mu\psi_1)(\bar{\psi}'_4\gamma^\nu\psi'_2)-(\bar{\psi}_3\gamma^\mu\psi_2)(\bar{\psi}'_4\gamma^\nu\psi'_1)$$

---

① 由于这种反对易，算符 $\hat{j}(x)$ 和 $\hat{j}(x')$ 在这里可以认为(在计算矩阵元时)是对易的，因而可以略去 $T$ 乘积的符号．

$$-(\bar{\psi}_4\gamma^\mu\psi_1)(\bar{\psi}'_3\gamma^\nu\psi'_2). \tag{73.9}$$

我们看到，这个总和的符号规定为依式(73.5)中"外"电子算符的顺序而定．这与下述事实一致：全同费米子散射时矩阵元的符号一般是任意的．当然，式(73.9)中各项的相对符号与外算符的顺序无关．

式(73.9)的每一行中的两项，区别仅仅是同时交换了指标 $\mu$, $\nu$ 和宗量 $x, x'$．显然，这种交换对矩阵元(73.3)没有影响[在(73.3)中因子的顺序仍然由符号 $T$ 决定]．因此，当式(73.3)和(73.9)相乘并对 $d^4xd^4x'$ 积分时，式(73.9)中的四项给出两对相同的结果，因而矩阵元是

$$S_{fi}=\mathrm{i}e^2\iint d^4xd^4x'\cdot D_{\mu\nu}(x-x')\{(\bar{\psi}_4\gamma^\mu\psi_2)(\bar{\psi}'_3\gamma^\nu\psi'_1)$$
$$-(\bar{\psi}_4\gamma^\mu\psi_1)(\bar{\psi}'_3\gamma^\nu\psi'_2)\} \tag{73.10}$$

(注意：这里没有因子 1/2!)

电子波函数是平面波(64.8)．所以，大括号中的表达式为

$$\begin{aligned}\{\cdots\}&=(\bar{u}_4\gamma^\mu u_2)(\bar{u}_3\gamma^\nu u_1)e^{-i(p_2-p_4)x-i(p_1-p_3)x'}\\&\quad-(\bar{u}_4\gamma^\mu u_1)(\bar{u}_3\gamma^\nu u_2)e^{-i(p_1-p_4)x-i(p_2-p_3)x'}\\&=\{(\bar{u}_4\gamma^\mu u_2)(\bar{u}_3\gamma^\nu u_1)e^{-i[(p_2-p_4)+(p_3-p_1)]\xi/2}\\&\quad-(\bar{u}_4\gamma^\mu u_1)(\bar{u}_3\gamma^\nu u_2)e^{-i[(p_1-p_4)+(p_3-p_2)]\xi/2}\}\\&\quad\cdot e^{-i(p_1+p_2-p_3-p_4)X},\end{aligned}$$

式中 $X=(x+x')/2, \xi=x-x'$．对 $d^4xd^4x'$ 的积分变成对 $d^4\xi d^4X$ 积分．对 $d^4X$ 的积分给出 $\delta$ 函数(因之，$p_1+p_2=p_3+p_4$)．然后由矩阵 $S$ 变成矩阵 $M$(§64)，最后，我们得到散射振幅

$$M_{fi}=e^2\{(\bar{u}_4\gamma^\mu u_2)D_{\mu\nu}(p_4-p_2)(\bar{u}_3\gamma^\nu u_1)$$
$$-(\bar{u}_4\gamma^\mu u_1)D_{\mu\nu}(p_4-p_1)(\bar{u}_3\gamma^\nu u_2)\}. \tag{73.11}$$

这里我们引用了动量表象中的光子传播函数

$$D_{\mu\nu}(k)=\int D_{\mu\nu}(\xi)e^{ik\xi}d^4\xi. \tag{73.12}$$

振幅(73.11)中的两项可以分别用所谓的**费曼图**表示

第一项的费曼图为

$$e^2(\bar{u}_4\gamma^\mu u_2)D_{\mu\nu}(k)(\bar{u}_3\gamma^\nu u_1)= \tag{73.13}$$

图中的每个交点(图形的**顶点**)对应一个因子 $\gamma$. 指向顶点的实线(“入线”)代表初态电子，对应于因子 $u$——相应电子态的双旋量振幅;离开顶点的实线(“出线”)代表终态电子,对应于因子$\bar{u}$.“读”图的时候，这些因子自左至右的顺序对应着沿实线逆箭头方向移动的顺序. 两个顶点用虚线连接，虚线代表一个中间态**虚**光子从一个顶点“辐射”出来而在另一个顶点被“吸收”. 这条虚线对应着一个因子$-iD_{\mu\nu}(k)$. 虚光子的四维动量 $k$ 由顶点上的“四维动量守恒”决定:入线和出线的总动量相等. 在现在的情况下,$k=p_1-p_3=p_4-p_2$. 除了上述所说的因子外,还应赋予整个图形一个因子$(-ie^2)$(幂指数为图形的顶点数)，因而代表 $iM_{fi}$ 中的一项. 类似地,式(73.11)中第二项的费曼图为

$$e^2(\bar{u}_4\gamma^\mu u_1)D_{\mu\nu}(k')(\bar{u}_3\gamma^\nu u_2)= \tag{73.14}$$

(请注意:$k'=p_1-p_4=p_3-p_2$). 由于张量 $D_{\mu\nu}$ 是对称的,不管是从 $p_3$ 端还是从 $p_4$ 端开始读图都没关系，所得到的表达式完全一样. 同样,由于函数 $D_{\mu\nu}(k)$具有偶宇称 (参看 §76)，虚光子线的方向也是无所谓的,方向的改变只不过使 $k$ 变号罢了.

初态粒子和终态粒子所对应的线叫**外线**或图形的**自由端**. 式(73.13)和(73.14)两个费曼图的区别仅仅在于交换了两个电子的

自由端（$p_3$ 和 $p_4$）. 两个费米子的这种交换改变了费曼图的符号. 这一法则相当于散射振幅(73.11)中的两项有不同的符号.

后面我们都是用动量表象中的费曼图. 但是，它们也可与原来坐标表象中的散射振幅的各项相对应［参看积分(73.10)］. 这时，电子振幅由相应的坐标波函数代替，传播函数也在坐标表象中. 每一个顶点对应一个积分变量［(73.10)中的 $x$ 或 $x'$］；相交于一个顶点的各条线所代表的因子也是相应变量的函数.

现在我们来研究一个电子和一个正电子的散射. 它们的初态动量分别用 $p_-$ 和 $p_+$ 表示，而终态动量用 $p'_-$ 和 $p'_+$ 表示.

在 $\psi$-算符(73.6)中，正电子的产生和湮灭算符分别与电子的湮灭和产生算符同时出现. 在前面讨论的情况下，算符 $\hat{\psi}$ 湮灭两个初态粒子，算符 $\hat{\bar{\psi}}$ 产生两个终态粒子；而现在这两个算符对电子和正电子的作用却是相反的. 因而共轭函数 $\bar{\psi}(-p_-)$ 现在将描述初态正电子，而终态正电子用 $\psi(-p'_+)$ 描述（两个都是四维动量的函数而符号相反）. 考虑到这一差别，我们就得到散射振幅①

$$M_{fi}=-e^2[\bar{u}(p'_-)\gamma^\mu u(p_-)]D_{\mu\nu}(p_- - p'_-)[\bar{u}(-p_+)\gamma^\nu u(-p'_+)]$$
$$+e^2[\bar{u}(-p_+)\gamma^\mu u(p_-)]D_{\mu\nu}(p_- + p_+)[\bar{u}(p'_-)\gamma^\nu u(-p'_+)]. \tag{73.15}$$

这个表达式中两项的费曼图为



(73.16)

① 在非全同粒子散射的情况下，整个振幅的符号是确定的，其确定方法是：在(73.5)中，"外"算符的排列顺序应该使两个电子的算符在两头：

$$\langle 0|a'b'\cdots b^+a^+|0\rangle$$

（或者都在中间）. 这一条件保证了真空的初态和终态有"相同的符号". 振幅的符号也可以由非相对论极限加以证明：后面我们将看到(§ 81)，在这个极限中，(73.15)中的第二项趋于零，而第一项趋于卢瑟福散射的玻恩振幅.

作图法则上的变化仅限于与正电子有关的部分．实的入线和出线仍然分别表示因子 $u$ 和 $\bar{u}$，不过现在入线代表终态正电子，出线代表初态正电子，并且所有正电子的动量都取相反符号．

请注意(73.16)两个图形的区别．在第一个图形中，初态电子线和终态电子线相交于一个顶点，初态正电子线和终态正电子线相交于另一个顶点．而在第二个图形中，初态电子线和初态正电子线相交于一个顶点，终态电子线和终态正电子线相交于另一个顶点；上顶点表示电子对湮灭同时发射一个虚光子，而下顶点表示电子对由这个虚光子产生．

这个区别使两个图形中虚光子的性质有所不同．在第一个图形中（“散射”型），虚光子的四维动量等于两个电子（或正电子）的四维动量之差，因此，$k^2<0$［参看(73.1)］．而在第二个图形中（“湮灭”型），$k'=p_-+p_+$，因此，$k^2>0$．在这里应该指出，对于虚光子，恒有 $k^2\neq0$，这与实光子不同；对于实光子，$k^2=0$．

如果碰撞粒子不是全同粒子，也不是一个粒子和它的反粒子（譬如说电子和 μ 子），那么散射振幅只需用一个图形表示

$p^{(e)\prime}$　　$p^{(e)}$

$k$　　　　(73.17)

$p^{(\mu)\prime}$　　$p^{(\mu)}$

在这种情况下，费曼图不可能是湮灭型或交换型．我们可以用解析法求出这个结果：将流算符写成电子流和 μ 子流之和：

$$\hat{j}=\hat{j}^{(e)}+\hat{j}^{(\mu)}=(\hat{\bar{\psi}}^{(e)}\gamma\hat{\psi}^{(e)})+(\hat{\bar{\psi}}^{(\mu)}\gamma\hat{\psi}^{(\mu)})$$

并且在乘积 $\hat{j}^{(\mu)}(x)\hat{j}^{(\nu)}(x')$ 中取这样一些项的矩阵元，这些项能够给出所要求的粒子的湮灭和产生．

现在我们来研究一级过程．我们在本节开始曾指出，这种过程是四维动量守恒定律所禁止的．这种跃迁的算符

$$\hat{S}^{(1)} = -\mathrm{i}e\int \hat{j}(x)\hat{A}(x)\mathrm{d}^4x \tag{73.18}$$

的矩阵元对应于“在同一点 $x$”产生或湮灭三个真实粒子：两个电子和一个光子．它们因算符$\hat{\psi}(x)$和$\hat{\bar{\psi}}(x)$在同一点 $x$ 收缩而出现，且表示为积分

$$S_{fi} = -\mathrm{i}e\int \overline{\psi_2}(x)\psi_1(x)[\gamma A^*(x)]\mathrm{d}^4x$$

(例如，在发射光子的情况下)；由于被积函数中包含着指数不为零的因子 $\exp[-\mathrm{i}(p_1-p_2-k)x]$，所以这个积分为零．用费曼图的语言来说，这意味着具有三个自由端的图形

$k$ $p_2$ $p_1$ (73.19)

等于零．

由于同样的原因，在初态或终态中有六个粒子参加的二级过程是不可能的．在这类跃迁的矩阵元 $S_{fi}$ 中，对$\mathrm{d}^4x\mathrm{d}^4x'$的积分将分成对 $\mathrm{d}^4x$ 和对 $\mathrm{d}^4x'$的两个等于零的积分的乘积（这两个积分的被积函数是在同一点上所取的三个波函数的乘积）．换句话说，相应的费曼图分成如(73.19)那样的两个独立图形．

## § 74. 光子散射的费曼图

我们来研究另一种二级效应——电子对光子的散射（康普顿效应）．设初态中光子和电子的四维动量为 $k_1$ 和 $p_1$，而终态中为 $k_2$ 和 $p_2$(而且光子和电子都有确定的极化，为简单起见，我们将它略去)．

光子的矩阵元为

$$\langle 2|TA_\mu(x)A_\nu(x')|1\rangle = \langle 0|c_2TA_\mu(x)A_\nu(x')c_1^+|0\rangle, \tag{74.1}$$

式中

$$\hat{A}=\sum_k(\hat{c}_k A_k+\hat{c}_k^+ A_k^*).$$

将外算符和内算符收缩，我们得到

$$(74.1)=\underbrace{c_2 A_\mu} \underbrace{A'_\nu c_1^+}+c_2\overbrace{A_\mu A'_\nu}c_1^+=A^*_{2\mu}A'_{1\nu}+A_{1\mu}A'^*_{2\nu} \tag{74.2}$$

(这里用了算符 $\hat{c}_1, \hat{c}_2^+$ 的对易性；由于同样的原因，符号 $T$ 在这里可以略去).

电子的矩阵元为

$$\langle 2|Tj^\mu(x)j^\nu(x')|1\rangle=\langle 0|a_2 T(\bar{\psi}\gamma^\mu\psi)(\bar{\psi}'\gamma^\nu\psi')a_1^+|0\rangle. \tag{74.3}$$

式中包含 4 个 $\psi$ 算符，其中只有两个与电子 1 的湮灭和电子 2 的产生有关即与算符 $\hat{a}_1^+$ 及 $\hat{a}_2$ 一起收缩. 这两个算符可以是 $\hat{\bar{\psi}}'$, $\hat{\psi}$ 或 $\hat{\psi}'$, $\hat{\bar{\psi}}$(而不是 $\hat{\psi}$, $\hat{\bar{\psi}}$ 或 $\hat{\psi}'$, $\hat{\bar{\psi}}'$; 在同一点 $x$ 或 $x'$ 上产生和湮灭两个实电子和一个实光子将给出一个等于零的表达式). 用两种可能的方法进行收缩，我们就在矩阵元(74.3) 中得到两项. 假设 $t>t'$，可以首先写出这两项:

$$(74.3)=\underbrace{a_2(\bar{\psi}}\gamma^\mu\psi)(\bar{\psi}'\gamma^\nu\underbrace{\psi')a_1^+}+\underbrace{a_2(\bar{\psi}\gamma^\mu\overbrace{\psi)(\bar{\psi}'}}\gamma^\nu\psi')a_1^+. \tag{74.4}$$

在第一项中被收缩的算符为

$$\hat{a}_2\hat{\bar{\psi}}\longrightarrow\hat{a}_2\hat{a}_2^+\bar{\psi}_2,\qquad \hat{\psi}'\hat{a}_1^+\longrightarrow\hat{a}_1\hat{a}_1^+\psi'_1.$$

由于算符 $\hat{a}_2\hat{a}_2^+$ 和 $\hat{a}_1\hat{a}_1^+$ 是对角化的且出现在乘积的两头，因而可以用它们的真空平均值 1 代替. 为了对式(74.4)中的第二项进行类似的变换，首先必须把算符 $\hat{a}_2^+$“拉”到左端，把 $\hat{a}_1$“拉”到右端. 这可以借助于算符 $\hat{a}_p, \hat{a}_p^+$ 的对易法则

$$\{\hat{a}_p, \hat{\psi}\}_+ = \{\hat{a}_p^+, \hat{\overline{\psi}}\}_+ = 0,$$
$$\{\hat{a}_p, \hat{\overline{\psi}}\}_+ = \overline{\psi}_p, \{\hat{a}_p^+, \hat{\psi}\}_+ = \psi_p \tag{74.5}$$

来实现. 结果,式(74.4)变为

$$\langle 0|(\overline{\psi_2}\gamma^\mu\hat{\psi})(\hat{\overline{\psi}}'\gamma^\nu\psi_1') - (\hat{\overline{\psi}}\gamma^\mu\psi_1)(\overline{\psi_2'}\gamma^\nu\hat{\psi}')|0\rangle, t>t' \tag{74.6}$$

(当然,只是算符因子取平均值). 类似地,当 $t<t'$ 时, 我们得到的表达式和(74.6)的区别仅仅是交换了指标 $\mu,\nu$ 和带撇与不带撇的记号:

$$\langle 0|-(\hat{\overline{\psi}}'\gamma^\nu\psi_1')(\overline{\psi_2}\gamma^\mu\hat{\psi}) + (\overline{\psi_2'}\gamma^\nu\hat{\psi}')(\hat{\overline{\psi}}\gamma^\mu\psi_1)|0\rangle, t<t'. \tag{74.7}$$

式(74.6)和(74.7) 两个表达式可以写成统一的形式. 为此,可以利用 $\psi$ 算符的编时乘积

$$T\hat{\psi}_i(x)\hat{\overline{\psi}}_k(x') = \begin{cases}\hat{\psi}_i(x)\hat{\overline{\psi}}_k(x'), & t'<t,\\ -\hat{\overline{\psi}}_k(x')\hat{\psi}_i(x), & t'>t\end{cases} \tag{74.8}$$

($i,k$ 为双旋量指标). 于是式(74.6),(74.7) 中的第一项和第二项可以合并成

$$\overline{\psi}_2\gamma^\mu\langle 0|T\psi\cdot\overline{\psi'}|0\rangle\gamma^\nu\psi_1 + \overline{\psi}_2'\gamma^\nu\langle 0|T\psi'\cdot\overline{\psi}|0\rangle\gamma^\mu\psi_1 \tag{74.9}$$

($\psi\cdot\overline{\psi}$ 代表矩阵 $\psi_i\overline{\psi_k}$).

应该指出,按照自然定义(74.8),算符的乘积在 $t<t'$ 和 $t>t'$ 时取不同的符号. 这一点不同于对算符 $\hat{A}$ 和 $\hat{j}$ 所使用的 $T$ 乘积的定义. 这一区别的根源在于费米算符 $\hat{\psi}$、$\hat{\overline{\psi}}$ 在光锥外面是反对易的(与对易的玻色算符 $\hat{A}$ 以及双线性算符 $\hat{j}=\hat{\overline{\psi}}\gamma\hat{\psi}$ 不同)①. 这样做保证了定义(74.8)的相对论不变性 ($\psi$ 算符对易规则的形式

---

① 我们知道,$\psi$ 算符本身并不对应任何可测量的物理量,因而在光锥外面不需要对易.

证明将在 §75 中给出)①.

我们引入**电子传播函数**(或叫**电子传播子**)——2 秩双旋量 $G_{ik}(x-x')$,其定义为

$$G_{ik}(x-x') = -\mathrm{i}\langle 0|T\psi_i(x)\overline{\psi}_k(x')|0\rangle. \quad (74.10)$$

这时,电子的矩阵元可以写成

$$\langle 2|Tj^\mu(x)j^\nu(x')|1\rangle = \mathrm{i}\overline{\psi}_2\gamma^\mu G\gamma^\nu\psi_1' + \mathrm{i}\overline{\psi}_2'\gamma^\nu G\gamma^\mu\psi_1. \quad (74.11)$$

乘以光子的矩阵元(74.1)并对 $\mathrm{d}^4x\mathrm{d}^4x'$ 积分,式(74.11)中的两项给出相同的结果,因而我们得到

$$S_{fi} = -\mathrm{i}e^2\iint\mathrm{d}^4x\mathrm{d}^4x'\overline{\psi}_2(x)\gamma^\mu G(x-x')\gamma^\nu\psi_1(x')$$
$$\times\{A_{2\mu}^*(x)A_{1\nu}(x') + A_{2\nu}^*(x')A_{1\mu}(x)\}. \quad (74.12)$$

对电子和光子波函数代入平面波 (64.8)和 (64.9),并像在(73.10)中那样分出 $\delta$ 函数,最后我们得到散射振幅

$$M_{fi} = -4\pi e^2\overline{u}_2\{(\gamma e_2^*)G(p_1+k_1)(\gamma e_1)$$
$$+(\gamma e_1)G(p_1-k_2)(\gamma e_2^*)\}u_1, \quad (74.13)$$

式中 $e_1, e_2$ 为光子的四维极化矢量,$G(p)$为动量表象中的电子传播函数.

这个表达式中的两项可以用下面两个费曼图表示:

---

① 任意数目的 $\psi$ 算符的 $T$乘积都可类似地定义. 它等于按时间增大顺序自右至左排列的所有这些算符的乘积. 由 $T$乘积符号下的顺序变成上述顺序时,交换次数的奇偶性决定乘积的符号. 由此可知,交换任意两个 $\psi$ 算符,$T$乘积的符号都要改变. 例如:

$$T\hat{\psi}_i(x)\hat{\overline{\psi}}_k(x') = -T\hat{\overline{\psi}}_k(x')\hat{\psi}_i(x).$$

$$4\pi e^2\bar{u}_2(\gamma e_2^*)G(f)(\gamma e_1)u_1 =$$ [图: 费曼图，外线 $k_2$, $k_1$, $p_2$, $p_1$，内线 $f=p_1+k_1$]

$$4\pi e^2\bar{u}_2(\gamma e_1)G(f')(\gamma e_2^*)u_1 =$$ [图: 费曼图，外线 $p_2$, $k_1$, $k_2$, $p_1$，内线 $f'=p_1-k_2$] (74.14)

用虚线表示的图形的自由端对应着真实光子，入线（初态光子）和因子$\sqrt{4\pi}\,e$ 相联系，出线（终态光子）和因子$\sqrt{4\pi}\,e^*$ 相联系。这里的 $e$ 为四维极化矢量。在第一个图形中，初态光子和初态电子一起被吸收，终态光子和终态电子一起被发射出来。在第二个图形中，发射终态光子的同时湮灭初态电子，而吸收初态光子的同时产生终态电子。

连接两个顶点的内实线代表虚电子，其四维动量由顶点上的四维动量守恒决定。这条线和因子 $iG(f)$ 相联系。和真实粒子的四维动量不同，虚电子的四维动量的平方不等于 $m^2$。例如，在电子的静止参考系中研究不变量 $f^2$ 的时候，不难求出：

$$f^2=(p_1+k_1)^2>m^2,\quad f'^2=(p_1-k_2)^2<m^2. \qquad (74.15)$$

## § 75. 电子的传播函数

在 § 73 和 § 74 中定义的传播函数（传播子）在量子电动力学的表述体系中有着基本的意义。光子传播函数 $D_{\mu\nu}$ 是表征两个电子相互作用的基本量。这可以从它在电子散射振幅中所占的位置看出来：在电子散射振幅中，$D_{\mu\nu}$ 与两个粒子的跃迁流是相乘的。在电子-光子相互作用中，电子传播函数有着类似的作用。

现在来进行这些传播函数的实际计算，我们首先从电子情况

着手.

让算符 $\gamma p - m$（此处 $p_\mu = \mathrm{i}\partial_\mu$）作用在函数

$$G_{ik}(x-x') = -\mathrm{i}\langle 0|T\psi_i(x)\overline{\psi}_k(x')|0'\rangle \qquad (75.1)$$

上，$i$ 和 $k$ 是双旋量指标. 由于 $\hat{\psi}(x)$ 满足狄拉克方程 $(\gamma p - m)\hat{\psi}(x) = 0$，因而我们发现，除了 $t = t'$ 以外的所有点 $x$ 上，结果都为零. 其原因是当 $t \to t'+0$ 和 $t \to t'-0$ 时 $G(x-x')$ 趋于不同的极限：根据定义(74.8)，这些极限分别等于

$$-\mathrm{i}\langle 0|\psi_i(\boldsymbol{r},t)\overline{\psi}_k(\boldsymbol{r}',t)|0\rangle \text{ 和 } +\mathrm{i}\langle 0|\overline{\psi}_k(\boldsymbol{r}',t)\psi_i(\boldsymbol{r},t)|0\rangle,$$

并且我们将要看到，它们在光锥上是不一样的. 这使得导数 $\partial G/\partial t$ 出现一个附加的 $\delta$ 函数项：

$$\frac{\partial G}{\partial t} = -\mathrm{i}\langle 0|T\frac{\partial\psi_i(x)}{\partial t}\overline{\psi}_k(x')|0\rangle + \delta(t-t')(G_{t\to t'+0} - G_{t\to t'-0}). \qquad (75.2)$$

注意到，在算符 $\gamma p - m$ 中对 $t$ 的导数是以 $\mathrm{i}\gamma^0\partial/\partial t$ 的形式出现的，因而我们有

$$(\gamma p - m)_{ik}G_{kl}(x-x') = \delta(t-t')\gamma^0_{ik}\langle 0|\{\psi_k(\boldsymbol{r},t), \overline{\psi}_l(\boldsymbol{r}',t)\}_+|0\rangle. \qquad (75.3)$$

反对易子的求法如下、将算符 $\hat{\psi}(\boldsymbol{r},t)$ 和 $\hat{\overline{\psi}}(\boldsymbol{r}',t)$［见(73.6)］相乘，利用费米子算符 $_p$, $\hat{b}\hat{a}_p$ 的对易规则，我们得到

$$\{\hat{\psi}_i(\boldsymbol{r},t), \hat{\overline{\psi}}_k(\boldsymbol{r}',t)\}_+ = \sum_{\boldsymbol{p}}[\psi_{\boldsymbol{p}i}(\boldsymbol{r})\overline{\psi}_{\boldsymbol{p}k}(\boldsymbol{r}') + \psi_{-\boldsymbol{p}i}(\boldsymbol{r})\overline{\psi}_{-\boldsymbol{p}k}(\boldsymbol{r}')], \qquad (75.4)$$

式中 $\psi_{\pm\boldsymbol{p}}(\boldsymbol{r})$ 是没有时间因子的波函数（同§73和§74，为简单计，略去了极化指标）. 电子哈密顿算符的所有本征函数 $\psi_{\pm\boldsymbol{p}}(\boldsymbol{r})$ 的集合构成正交归一化函数的一个完全集. 根据这种系统的一般性质［比较第三卷(5.12)］，我们有

$$\sum_{p}[\psi_{pi}(\boldsymbol{r})\psi^*_{pk}(\boldsymbol{r}')+\psi_{-pi}(\boldsymbol{r})\psi^*_{-pk}(\boldsymbol{r}')]=\delta_{ik}\delta(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}'). \tag{75.5}$$

式(75.4)右端的和等于 $\gamma^0_{ik}\delta(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}')$，它与式(75.5)中求和的区别在于 $\psi^*_k$ 换成了 $(\psi^*\gamma^0)_k$. 所以，

$$\{\hat{\psi}_i(\boldsymbol{r},t),\ \hat{\bar{\psi}}_k(\boldsymbol{r}',t)\}_+=\delta(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}')\gamma^0_{ik}. \tag{75.6}$$

特别是，由这个公式可以得出我们在§74中说过的结论：算符 $\hat{\psi}$ 和 $\hat{\bar{\psi}}$ 在光锥外面反对易. 当 $(x-x')^2<0$ 时，总有一个参考系，在这个参考系中 $t=t'$；这时如果 $\boldsymbol{r}\neq\boldsymbol{r}'$，反对易子(75.6)事实上等于零.

将式(75.6)代入(75.3)（并略去双旋量指标），我们最后求得①

$$(\gamma\hat{p}-m)G(x-x')=\delta^{(4)}(x-x'). \tag{75.7}$$

这样，电子传播函数满足右边有一个 $\delta$ 函数的狄拉克方程，所以，电子传播函数就是狄拉克方程的**格林函数**.

后面我们关心的将不是函数 $G(\xi)$ 本身($\xi=x-x'$)，而是它的傅里叶分量

$$G(p)=\int G(\xi)e^{ip\xi}d^4\xi \tag{75.8}$$

（动量表象中的传播函数）. 式(75.7)的两端取傅里叶分量，我们看到，$G(p)$满足代数方程

$$(\gamma p-m)G(p)=1. \tag{75.9}$$

这个方程的解是

$$G(p)=\frac{\gamma p+m}{p^2-m^2}. \tag{75.10}$$

---

① 包含双旋量指标的式子为

$$(\gamma\hat{p}-m)_{il}G_{lk}(x-x')=\delta^{(4)}(x-x')\delta_{ik}. \tag{75.7a}$$

$G(p)$ 中的四维矢量 $p$ 的四个分量是独立变量（但不存在关系式 $p^2 \equiv p_0^2 - \boldsymbol{p}^2 = m^2$）. 如果将(75.10) 中的分母写成 $p_0^2 - (\boldsymbol{p}^2 + m^2)$, 我们将看到, $G(p)$ 作为给定 $\boldsymbol{p}^2$ 时 $p_0$ 的一个函数, 在 $p_0 = \pm \varepsilon$ 时有两个极点, 这里 $\varepsilon = \sqrt{\boldsymbol{p}^2 + m^2}$. 因此, 在积分

$$G(\xi) = \frac{1}{(2\pi)^4}\int e^{-ip\xi} G(p) d^4p$$

$$= \frac{1}{(2\pi)^4}\int d^3p \cdot e^{i\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{r}} \int dp_0 \cdot e^{-ip_0\tau} G(p) \tag{75.11}$$

中 $(\tau = t - t')$, 对 $dp_0$ 积分时出现了如何避开极点的问题. 在这个问题解决之前, 表达式(75.10)实质上仍然是未定的.

为了解决这个问题, 我们回到原始定义(75.1)上来. 在(75.1)中代入 $\psi$ 算符的求和形式[见(73.6)], 并且注意到非零的真空平均值只能是产生算符和湮灭算符的下列乘积之值

$$\langle 0|a_p a_p^+|0\rangle = 1, \quad \langle 0|b_p b_p^+|0\rangle = 1$$

(由于真空态中没有粒子, 所以一个粒子在被算符 $\hat{a}_p$ 或 $\hat{b}_p$"湮灭"之前, 必须先由算符 $\hat{a}_p^+$ 或 $\hat{b}_p^+$ 产生). 结果, 我们得到

$$\left.\begin{aligned}
G_{ik}(x-x') &= -i\sum_p \psi_{pi}(\boldsymbol{r}, t)\, \bar{\psi}_{pk}(\boldsymbol{r}', t') \\
&= -i\sum_p e^{-i\varepsilon(t-t')} \psi_{pi}(\boldsymbol{r})\, \bar{\psi}_{pk}(\boldsymbol{r}') \quad \text{当} t - t' > 0 \text{时}; \\
G_{ik}(x-x') &= i\sum_p \bar{\psi}_{-pk}(\boldsymbol{r}', t')\, \psi_{-pi}(\boldsymbol{r}, t) \\
&= i\sum_p e^{i\varepsilon(t-t')} \psi_{-pi}(\boldsymbol{r})\, \bar{\psi}_{-pk}(\boldsymbol{r}') \quad \text{当 } t - t' < 0 \text{ 时}
\end{aligned}\right\} \tag{75.12}$$

(对于 $t > t'$, 只有电子项对 $G$ 有贡献; 对于 $t < t'$, 只有正电子项对 $G$ 有贡献).

如果把对 $\boldsymbol{p}$ 的求和换成对 $d^3p$ 的积分, 并且比较 (75.12) 和 (75.11), 我们看到, 积分

$$\int e^{-ip_0\tau}G(p)dp_0 \tag{75.13}$$

必须有一个相因子 $e^{-i\varepsilon\tau}$(对于 $\tau>0$)和 $e^{i\varepsilon\tau}$(对于 $\tau<0$). 为了满足这一点，只要在复变量 $p_0$ 的平面中从上面绕过极点 $p_0=\varepsilon$，从下面绕过极点 $p_0=-\varepsilon$ 就行了：

-ε 0 +ε (75.14)

实际上，当 $\tau>0$ 时，积分路径由下半平面上的无限大半圆闭合，因而积分(75.13)的值由极点 $p_0=+\varepsilon$ 的留数给出；当 $\tau<0$ 时，积分路径在上半平面中闭合，积分由极点 $p_0=-\varepsilon$ 的留数给出．这样就得到了两种情况下所要求的结果．

极点的这一绕行规则(费曼规则) 可用另一种方法叙述如下：积分处处沿实轴进行，但粒子的质量 $m$ 有一无穷小的负虚部：

$$m\longrightarrow m-i0. \tag{75.15}$$

因而，我们有

$$\varepsilon\longrightarrow\sqrt{\boldsymbol{p}^2+(m-i0)^2}=\sqrt{\boldsymbol{p}^2+m^2-i0}=\varepsilon-i0.$$

换句话说，极点 $p_0=\pm\varepsilon$ 从实轴上向下和向上被移开：

-ε+i0 0 +ε-i0 (75.16)

因而沿此轴的积分等价于沿着路径(75.14) 的积分①．运用规则(75.15)，传播函数(75.10)可以写成

$$G(p)=\frac{\gamma p+m}{p^2-m^2+i0}. \tag{75.17}$$

对被移极点的积分法则可以借助关系式

① 值得注意的是，极点的移动规则相应于 $G(x-x')$ 对 $|\tau|\equiv|t-t'|$ 的一个无穷小衰减．实际上，如果在被移动的极点处把 $p_0$ 的值写成 $-(\varepsilon-i\delta)$ 和 $+(\varepsilon-i\delta)$，而 $\delta\to+0$，那么积分(75.13)中的时间因子将变成 $\exp(-i\varepsilon|\tau|-\delta|\tau|)$．

$$\frac{1}{x+i0}=P\frac{1}{x}-i\pi\delta(x) \tag{75.18}$$

予以证明．这个关系式的意义应理解为：对它乘以任意一个函数 $f(x)$ 并进行积分，则有

$$\int_{-\infty}^{+\infty}\frac{f(x)}{x+i0}dx=\int_{-\infty}^{\infty}\frac{f(x)}{x}dx-i\pi f(0) \tag{75.19}$$

积分号上加一短划(或者积分号前加一个 $P$)表示主值．

格林函数(75.10)是双旋量因子 $\gamma p+m$ 和标量

$$G^{(0)}(p)=\frac{1}{p^2-m^2} \tag{75.20}$$

的乘积．相应的坐标函数 $G^{(0)}(\xi)$ 显然是方程

$$(\hat{p}^2-m^2)G^{(0)}(x-x')=\delta^{(4)}(x-x') \tag{75.21}$$

的解．也就是说，它是方程 $(\hat{p}^2-m^2)\psi=0$ 的格林函数．在这个意义上可以说，$G^{(0)}(x-x')$ 是标量粒子的传播函数．通过类似上面的计算不难看出，标量场的传播函数可以利用 $\psi$ 算符 (11.2) 表达为

$$G^{(0)}(x-x')=-i\langle 0|T\psi(x)\psi^+(x')|0\rangle, \tag{75.22}$$

这类似于定义(75.1)．这时，编时乘积被定义为(对所有玻色算符而言)：

$$T\hat{\psi}(x)\hat{\psi}^+(x')=\begin{cases}\hat{\psi}(x)\hat{\psi}^+(x'), & t>t';\\ \hat{\psi}^+(x')\hat{\psi}(x), & t<t'\end{cases} \tag{75.23}$$

($t>t'$ 和 $t<t'$ 时有相同的符号)．

## § 76. 光子的传播函数

迄今为止，只是在求实光子数变化情形下的矩阵元时，我们才用电磁场算符 $\hat{A}$ 的明显形式(在 § 43 和 § 74 中)．为此目的，我们只需把自由场的势写成按横向平面波展开的形式就足够了．

但是，这种表示并没有对任意一个场给出完全的描述．很明

显，散射图形(73.13)和(73.14)必须考虑电子的库仑相互作用. 这种相互作用由标量势 $\Phi$ 描述，肯定不能化成横向虚光子（可用满足 $\mathrm{div}\boldsymbol{A}=0$ 的矢量势描述)之间的交换①.

所以，从本质上说，我们还没有算符 $\hat{A}$ 的完备定义. 没有这个完备的定义，我们就不可能按照公式

$$D_{\mu\nu}(x-x')=\mathrm{i}\langle 0|TA_\mu(x)A_\nu(x')|0\rangle \tag{76.1}$$

直接计算光子传播函数. 另一方面，势的规范不唯一性，使电磁场的彻底量子化所必需引进的那些算符在很大程度上失去其物理意义.

不过，这些困难是纯粹形式上的，而非实质性的，可以利用传播函数的某些一般性质予以避免. 传播函数的这些性质从相对论不变性和规范不变性的要求来看是显而易见的.

仅仅依赖于四维矢量 $\xi=x-x'$ 的最一般的二秩四维张量是

$$D_{\mu\nu}(\xi)=g_{\mu\nu}D(\xi^2)-\partial_\mu\partial_\nu D^{(l)}(\xi^2), \tag{76.2}$$

式中 $D$, $D^{(l)}$是不变量 $\xi^2$ 的标量函数②. 这个张量必然是对称的.

在动量表象中，我们相应地有

$$D_{\mu\nu}(k)=D(k^2)g_{\mu\nu}+k_\mu k_\nu D^{(l)}(k^2), \tag{76.3}$$

式中 $D(k^2)$, $D^{(l)}(k^2)$是函数 $D(\xi^2)$, $D^{(l)}(\xi^2)$的傅里叶分量.

在物理量(散射振幅)中，光子传播函数需乘以两个电子的跃迁流，即以 $j^\mu_{21}D_{\mu\nu}j^\nu_{43}$ 的组合形式出现[例如，可参看公式(73.13)]. 但是由于电流守恒($\partial_\mu j^\mu=0$)，它的矩阵元 $j_{21}=\bar{\psi}_2\gamma\psi_1$ 满足四维

---

① 由于条件 $\mathrm{div}\boldsymbol{A}=0$，麦克斯韦方程组导致对 $\boldsymbol{A}$ 和$\Phi$ 的下列方程

$$\Box\boldsymbol{A}=-4\pi\boldsymbol{j}+\nabla\frac{\partial\Phi}{\partial t},\ \Delta\Phi=-4\pi\rho.$$

在这种规范中，$\Phi$ 满足静态泊松方程[与下面的(76.13)比较，其中 $D_{00}$ 为同一规范].

② 这些函数在宗量的以下三个值域是不同的(这三个值域在洛伦兹变换下是不相互交换的)：光锥之外的区域($\xi^2<0$)，光锥上部的区域($\xi^2>0,\xi_0>0$)和光锥下部的区域($\xi^2>0,\xi_0<0$).

横向性条件

$$k_\mu (j^\mu)_{21}=0, \tag{76.4}$$

式中 $k=p_2-p_1$[与式(43.13)比较]．因此很明显，任何物理结果都不会因代换

$$D_{\mu\nu}\longrightarrow D_{\mu\nu}+\chi_\mu k_\nu+\chi_\nu k_\mu \tag{76.5}$$

而改变．这里 $\chi_\mu$ 是 $\boldsymbol{k}$ 和 $k_0$ 的任意函数．选取 $D_{\mu\nu}$ 的这种任意性与场势规范的任意性相对应．

如果量 $\chi_\mu$ 不构成一个四维矢量，任意规范变换(76.5)会破坏式(76.3)中所假设的相对论不变形式 $D_{\mu\nu}$．但是，即使只考虑传播函数的相对论不变形式，我们也会看到，在式(76.3)中函数 $D^{(l)}(k^2)$ 的选择是完全任意的．这样的选择可以采取任何方便的形式而不影响任何物理结果 (Л. Д. Ландау, А. А. Абрикосов, И. М. Халатников, 1954)．

这样一来，确定传播函数就等价于确定一个规范不变函数 $D(k^2)$．如果取 $k^2$ 的一个给定值且选 $z$ 轴沿 $\boldsymbol{k}$ 方向，变换(76.5)将不影响分量 $D_{xx}=D_{yy}=-D(k^2)$．所以，利用势的任意规范来计算分量 $D_{xx}$ 就够了．

我们利用一个规范，其中 $\operatorname{div}\boldsymbol{A}=0$，且算符 $\boldsymbol{A}$ 由展开式(2.17)和(2.18)给出：

$$\hat{\boldsymbol{A}}=\sum_{\boldsymbol{k}\alpha}\sqrt{\frac{2\pi}{\omega}}(\hat{c}_{\boldsymbol{k}\alpha}\boldsymbol{e}^{(\alpha)}\mathrm{e}^{-ikx}+\hat{c}^+_{\boldsymbol{k}\alpha}\boldsymbol{e}^{(\alpha)*}\mathrm{e}^{ikx}),\ \omega=|\boldsymbol{k}| \tag{76.6}$$

(指标 $\alpha=1,2$ 代表极化状态)．算符 $\hat{c}$, $\hat{c}^+$ 乘积对真空的所有期望值中，非零的只有

$$\langle 0|c_{\boldsymbol{k}\alpha}c^+_{\boldsymbol{k}\alpha}|0\rangle=1.$$

由定义(76.1)，于是我们有

$$D_{ik}(\xi)=\frac{1}{(2\pi)^3}\int\frac{2\pi \mathrm{i}\mathrm{d}^3k}{\omega}\left(\sum_\alpha e_i^{(\alpha)}e_k^{(\alpha)*}\right)\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega|\tau|+\mathrm{i}\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{\xi}} \tag{76.7}$$

[$i,k$ 是三维矢量指标；对 $k$ 的求和已化成对 $d^3k/(2\pi)^3$ 的积分]. 因为式(76.1)中算符的乘积是编时的，所以在指数上出现差 $\tau=t-t'$ 的绝对值.

由式 (76.7) 可以看出，被积函数（除去因子 $e^{i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{\xi}}$）是函数 $D_{ik}(\boldsymbol{r},t)$的三维傅里叶展开式的分量. 对于 $D_{xx}=-D$，它等于

$$\frac{2\pi i}{\omega}e^{-i\omega|\tau|}\sum_{\alpha}|e_x^{(\alpha)}|^2=\frac{2\pi i}{\omega}e^{-i\omega|\tau|}.$$

为了得到 $D_{xx}(k^2)$，我们必须把这个函数展成时间的傅里叶积分展开公式为

$$\frac{2\pi i}{\omega}e^{-i\omega|\tau|}=-\frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^{\infty}\frac{4\pi}{k_0^2-\boldsymbol{k}^2+i0}e^{-ik_0\tau}dk_0 .$$

在 § 75 中解释过，这个积分的回路是从极点 $k_0=|\boldsymbol{k}|=\omega$ 下面经过，从极点 $k_0=-|\boldsymbol{k}|=-\omega$ 上面经过；对 $\tau>0$，积分值由极点 $k_0=+\omega$ 的留数决定；对 $\tau<0$，则由极点 $k_0=-\omega$ 的留数决定.

于是，我们最终求出

$$D(k^2)=\frac{4\pi}{k^2+i0}. \tag{76.8}$$

由此论证所得的分母中的 $+i0$ 与规则(75.15) 相一致：由光子的(零)质量中减去 $i0$. 从式(76.8)可以看出，相应的坐标函数 $D(\xi^2)$ 满足方程

$$-\partial_\mu\partial^\mu D(x-x')=4\pi\delta^{(4)}(x-x'), \tag{76.9}$$

也就是说，它是波动方程的格林函数.

我们通常取 $D^{(l)}=0$，即应用传播函数

$$D_{\mu\nu}=g_{\mu\nu}D(k^2)=\frac{4\pi}{k^2+i0}g_{\mu\nu} \tag{76.10}$$

(费曼规范).

我们还要指出另外一些规范，它们在某些应用中比较方便.

令 $D^{(l)}=-D/k^2$，我们得到形如

$$D_{\mu\nu}=\frac{4\pi}{k^2}\left(g_{\mu\nu}-\frac{k_\mu k_\nu}{k^2}\right) \tag{76.11}$$

的传播函数(朗道规范)，且有 $D_{\mu\nu}k^\nu=0$. 这种选择类似于势的洛伦兹规范($A_\mu k^\mu=0$).

与势的三维规范条件 $\mathrm{div}\boldsymbol{A}=0$ 相类似的传播函数规范条件为

$$D_{il}k^l=0, D_{0l}k^l=0.$$

这些条件连同等式 $D_{xx}=-D=-4\pi/k^2$ 给出

$$D_{il}=-\frac{4\pi}{\omega^2-\boldsymbol{k}^2}\left(\delta_{il}-\frac{k_i k_l}{\boldsymbol{k}^2}\right). \tag{76.12}$$

为了得到这个 $D_{il}$，必须对传播函数(76.10)运用变换(76.5)，并且假设

$$\chi_0=-\frac{4\pi\omega}{(\omega^2-\boldsymbol{k}^2)\boldsymbol{k}^2}, \quad \chi_i=\frac{4\pi k_i}{(\omega^2-\boldsymbol{k}^2)\boldsymbol{k}^2}.$$

这时，对于其余的分量 $D_{\mu\nu}$，我们得到

$$D_{00}=-\frac{4\pi}{\boldsymbol{k}^2}, \quad D_{0i}=0. \tag{76.13}$$

这样的规范叫做**库仑规范**(E. Salpeter, 1952). 此处的 $D_{00}$ 是库仑势的傅里叶分量.

最后，与势的规范条件 $\Phi=0$ 相类似的传播函数规范为

$$D_{il}=-\frac{4\pi}{\omega^2-\boldsymbol{k}^2}\left(\delta_{il}-\frac{k_i k_l}{\omega^2}\right), \qquad D_{0i}=D_{00}=0. \tag{76.14}$$

这个形式用于非相对论性问题很方便(И. Е. Дзялошинский, Л. П. Пцтаевский, , 1959).

上述表达式属于传播函数的动量表象. 在有些情况下，使用混合的频率-坐标表象，即函数

$$D_{\mu\nu}(\omega,\boldsymbol{r})=\int D_{\mu\nu}(\omega,\boldsymbol{k})\mathrm{e}^{\mathrm{i}\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}}\frac{\mathrm{d}^3k}{(2\pi)^3} \tag{76.15}$$

比较方便. 在费曼规范(76.10)中，

$$D_{\mu\nu}(\omega, r) = g_{\mu\nu} D(\omega, r),$$

其中

$$D(\omega, r) = 4\pi \int \frac{e^{ik\cdot r}}{\omega^2 - k^2 + i0} \frac{d^3k}{(2\pi)^3} = -\frac{i}{\pi r}\int_0^\infty \frac{e^{ikr} - e^{-ikr}}{\omega^2 - k^2 + i0} k dk,$$

或者，在被积函数的第二项中将 $k$ 换成 $-k$:

$$D(\omega, r) = -\frac{i}{\pi r}\int_{-\infty}^{\infty} \frac{e^{ikr} k dk}{\omega^2 - k^2 + i0}.$$

此处积分回路是复变量 $k$ 的上半平面内的无限大半圆，积分相当于取极点 $k = |\omega| + i0$ 的留数．最后结果是

$$D(\omega, r) = -\frac{1}{r} e^{i|\omega|r}. \tag{76.16}$$

我们来讨论这个表达式．图形(73.13)和(73.14)所描写的过程可以直观地看成是电子 2 在电子 1 的场中（或电子 1 在电子 2 的场中)的散射．仅仅在 $\omega > 0$ 时，函数(76.16) 才对应于通常的“推迟”势$\propto e^{i\omega r}$[参看第二卷(64.1)和(64.2)]．但是,$\omega$ 的符号有赖于图中箭头 $k$ 的方向的选择．函数 $D(\omega, r)$的上述性质意味着在量子电动力学中，场源被看成是损失能量而发射一个虚光子的粒子．

作为本节的结尾，让我们来讨论自旋为 1 而质量不为零的粒子的传播函数问题．在这种情况下不存在规范的任意性，传播函数的选择是单一的．

将 $\psi$ 算符(14.16)代入定义式

$$G_{\mu\nu} = -i\langle 0 | T\psi_\mu(x)\psi_\nu^+(x') | 0\rangle, \tag{76.17}$$

我们得到一个表达式．这个表达式与式(76,7)的差别仅仅在于被积函数中对极化的求和为

$$\sum_\alpha u_\mu^{(\alpha)} u_\nu^{(\alpha)*}$$

所取代．对极化的求和等效于求平均且乘以独立极化数 3．求平

均给出非极化粒子的密度矩阵(14.15). 于是,我们求得矢量粒子传播函数的表达式

$$G_{\mu\nu}(p)=-\frac{1}{p^2-m^2+i0}\left(g_{\mu\nu}-\frac{p_\mu p_\nu}{m^2}\right). \tag{76.18}$$

传播函数(75.17)和(76.18)有类似的结构:分母中包含差 $p^2-m^2$,分子为给定自旋的非极化粒子的密度矩阵(相差一个因子).

## § 77. 图形方法的一般规则

在§73和§74中,我们对几个简单情形中的散射矩阵元进行了计算,这些计算包含了一般方法的所有基本特征.要推导相应的一般规则以计算任意级微扰论中的矩阵元,已不存在特别的困难.

如上所述,对于任意初态和终态之间的跃迁来说,散射算符 $\hat{S}$ 的矩阵元等于 $\hat{S}$ 右乘以所有初态粒子的产生算符、左乘以所有终态粒子的湮灭算符后所得到的算符对真空的平均值(期待值).

这样处理的结果,第 $n$ 级微扰论中的 $S$ 矩阵元取如下形式:

$$\begin{aligned}\langle f|S^{(n)}|i\rangle=&\frac{1}{n!}\langle 0|\cdots b_{2f}b_{1f}\cdots a_{1f}\cdots c_{1f}\\&\times\int d^4x_1\cdots d^4x_n T\{[\bar{\psi}_1(-ie\gamma A_1)\psi_1]\cdots\\&\times[\bar{\psi}_n(-ie\gamma A_n)\psi_n]\}\times c_{1i}^{+}\cdots a_{1i}^{+}\cdots b_{1i}^{+}\cdots|0\rangle\end{aligned} \tag{77.1}$$

下标 $1i,2i$ 标志初态粒子(分别为正电子,电子,光子),下标 $1f$, $2f$ 标志终态粒子;算符 $\hat{\psi}$ 和 $\hat{A}$ 的下标1,2,…表示: $\hat{\psi}_1=\hat{\psi}(x_1)$,….这里出现的算符 $\hat{\psi}$ 和 $\hat{A}$ 是各种状态中相应粒子的产生算符和湮灭算符的线性组合. 于是,我们得到矩阵元的表达式. 表达式的形式是粒子的产生和湮灭算符的乘积及其线性组合的真空期望值. 这些期望值的计算可用下述维克定理(G. C. Wick, 1950):

(1) 多个玻色算符 $c^+$, $c$ 的乘积对真空的期望值等于这些算符的所有可能配对的期望值(收缩)乘积之和. 每一对中因子的次

序与原来乘积中相同.

(2) 对相同粒子或不同粒子的费米算符 $a^+, a, b^+, b$，规则的不同处仅仅在于，求和中每一项的符号是正还是负，取决于把所有成对平均的费米算符放在一起所需交换算符的次数是偶数还是奇数.

显然，只有当乘积中的每个因子 $a, b, c$，都有对应的因子 $a^+$, $b^+$, $c^+$ 也在乘积中，对真空平均值才不为零. 另外，收缩的算符对 $(a, a^+)$，…只能属于同一状态，而且只能是 $a^+$，…在 $a$，…的右边：粒子先被产生，然后被湮灭(反之，期望值 $\langle 0|a^+a|0\rangle=0, \cdots$).

如果每个算符对 $(a, a^+)$，…在乘积中只出现一次，维克定理显然是正确的，这时，期望值可以化为诸配对期望值的单一乘积). 如果乘积中所有湮灭算符都在产生算符的右边，维克定理的正确性也是很显然的. 这样的乘积叫**正规乘积**. 这时期望值为零. 关于同一对算符在乘积中出现 $k$ 次的一般情形，维克定理的正确性不难用归纳法予以证明.

让我们考虑玻色算符对出现 $k$ 次的期望值 $\langle 0|\cdot\cdot cc^+\cdot\cdot|0\rangle$ (对于费米算符，以下的论证是完全类似的). 如果在某个配对中交换因子 $c$ 和 $c^+$，根据对易规则我们有

$$\langle 0|\cdot\cdot cc^+\cdot\cdot|0\rangle=\langle 0|\cdot\cdot c^+c\cdot\cdot|0\rangle+\langle 0|\cdot\cdot 1\cdot\cdot|0\rangle. \qquad (77.2)$$

期望值 $\langle 0|\cdot\cdot 1\cdot\cdot|0\rangle$ 包含 $k-1$ 个配对，且假定维克定理对它是正确的. 另一方面，若按维克定理将期望值 $\langle 0|\cdot\cdot cc^+\cdot\cdot|0\rangle$ 展开，它与 $\langle 0|\cdot\cdot c^+c\cdot\cdot|0\rangle$ 之差恰好是项

$$\langle 0|\cdot\cdot 1\cdot\cdot|0\rangle\langle 0|cc^+|0\rangle=\langle 0|\cdot\cdot 1\cdot\cdot|0\rangle$$

(在 $\langle 0|\cdot\cdot c^+c\cdot\cdot|0\rangle$ 的展开式中，相应的项 $\langle 0|\cdot\cdot 1\cdot\cdot|0\rangle\langle 0|c^+c|0\rangle$ 为零). 因此，由式(77.2)得出，如果维克定理对矩阵元 $\langle 0|\cdot\cdot c^+c\cdot\cdot|0\rangle$ 成立，则交换 $c$ 和 $c^+$ 以后定理仍然成立. 既然维克定理对因子的一个特定序列(正规乘积)成立，那么在任何情形下这个定

理都成立.

由于维克定理对算符 $\hat{a}, \hat{b}, \cdots$ 的乘积成立，因而对含有 $\hat{a}, \hat{b}, \cdots$ 以及它们的线性组合 $\hat{\psi}, \hat{\bar{\psi}}, \hat{A}$ 的任何乘积也成立. 将此定理应用于矩阵元(77.1)，就使它成为求和形式. 其中的每一项将是若干个配对的期望值的乘积. 这些期望值中将包括算符 $\hat{\psi}, \hat{\bar{\psi}}, \hat{A}$ 与"外"算符(即产生初态粒子或湮灭终态粒子的算符)的收缩. 这些收缩可借助初、终态粒子的波函数用如下公式表达:

$$\left.\begin{array}{ll}\langle 0|Ac_p^+|0\rangle = A_p, & \langle 0|c_pA|0\rangle = A_p^*,\\ \langle 0|\psi a_p^+|0\rangle = \psi_p, & \langle 0|a_p\bar{\psi}|0\rangle = \psi_p^*\\ \langle 0|b_p\psi|0\rangle = \psi_{-p}, & \langle 0|\bar{\psi}b_p^+|0\rangle = \bar{\psi}_{-p}\end{array}\right\} \qquad (77.3)$$

式中 $A_p$ 和 $\psi_p$ 是动量为 $p$ 的光子和电子的波函数(和§73, §74 中一样. 为简单计，略去了极化指标). 也将会出现 $T$ 乘积中"内"算符的收缩. 既然在应用维克定理时每次收缩配对中因子的次序都保持不变，那么，这些收缩中将保持算符的编时次序不变，因而它们可由相应的传播函数代替①.

运用维克定理从矩阵元得到的求和式中的每一项，都可由一个确定的费曼图表示. 在第 $n$ 级近似图中有 $n$ 个顶点，每个顶点对应于一个积分变量(四维矢量 $x_1, x_2, \cdots$). 在每个顶点上有三条线相交；两条实线(电子线)和一条虚线(光子线)，分别对应着电子算符($\hat{\psi}$ 和 $\hat{\bar{\psi}}$)和光子算符 ($\hat{A}$). 它们是同一变量 $x$ 的函数. 算符 $\hat{\psi}$ 对应入线，而 $\hat{\bar{\psi}}$ 对应出线.

为了具体说明，我们举几个三级近似的矩阵元的项与图形间

① 对后一论断需要做如下说明. 在证明维克定理时，我们用了算符 $\hat{c}$ 和 $\hat{c}^+$ 的对易规则. 这些规则只对实光子("横向"光子)有意义. 自然，"外"算符 $\hat{c}_i^+$, $\hat{c}_f$ 正是对应这样的(初态和终态)光子. 但是，在§76 中看到，$T$ 乘积中出现的算符 $\hat{A}$ 不仅仅描述横向光子. 这里出现的情况与 $D_{\mu\nu}$ 的计算(§76) 相类似. 由于相对论不变性和规范不变性，定理的正确性只需对那些由势的横向部分决定的乘积 (即张量的分量 $\langle 0|TA_\mu A_\nu\cdots|0\rangle$) 加以证明就够了. 因此，对任何乘积定理都成立.

相互对应的例子．略去积分号、算符记号、符号$T$以及因子$-ie\gamma$，也不写出算符的宗量，我们把这些项写成

$$\left.\begin{aligned}
&а\quad (\bar\varphi A\varphi)(\bar\varphi A\varphi)(\bar\varphi A\varphi)=\\
&б\quad (\bar\varphi A\varphi)(\bar\varphi A\varphi)(\bar\varphi A\varphi)=\\
&в\quad (\bar\varphi A\varphi)(\bar\varphi A\varphi)(\bar\varphi A\varphi)=\\
&г\quad (\bar\varphi A\varphi)(\bar\varphi A\varphi)(\bar\varphi A\varphi)=
\end{aligned}\right\}\qquad (77.4)$$

为清楚起见，电子的收缩和光子的收缩分别用实线和虚线画出．电子收缩的箭头方向从$\hat{\bar\varphi}$到$\hat\varphi$，如图所示．对于内光子收缩，其方向无关紧要(光子传播函数是$x-x'$的偶函数)．

这样得到的一些相互等效的项，这些等效项之间的差别只是交换了顶点编号，即顶点和变量$x_1, x_2, \cdots$之间的对应关系改变．简单地说，积分变量重新命名．这些置换数是$n!$．它正好消去式(77.1)中的因子$1/n!$．这样，差别仅仅是交换了顶点的那些图已不需再加考虑．在§73和§74中我们已经指出过这一点．例如，在二级近似中有两个等效图形．

$$\left.\begin{aligned}
&(\bar\varphi A\varphi)(\bar\varphi A\varphi)=\\
&(\bar\varphi A\varphi)(\bar\varphi A\varphi)=
\end{aligned}\right\}\qquad (77.5)$$

在(77.4)和(77.5)中仅仅画出了与图形内线相对应的内部收缩(虚电子和虚光子)．仍然是自由算符与外算符收缩，由此可以建

立图形的自由端和一定的初、终态粒子之间的对应关系. 于是，$\hat{\bar{\psi}}$ (与算符 $\hat{a}_f$ 或 $\hat{b}_i^+$ 收缩)给出终态电子线或初态正电子线，$\hat{\psi}$(与 $\hat{a}_i^+$ 或 $\hat{b}_f$ 收缩)给出初态电子线或终态正电子线. 自由算符 $\hat{A}$ (与 $\hat{c}_i^+$ 或 $\hat{c}_f$ 收缩)可与一个初态光子或一个终态光子对应. 这样，我们就得到一些拓扑上全同的图形 (即图形有同样数目且以同样方式配置的线)，差别仅仅是交换了入、出自由端之间的初态粒子和终态粒子.

每一个这样的交换显然等效于式(77.1)中外算符 $\hat{a}$, $\hat{b}$, …的某种交换. 因此，可以明显得出，如果初态粒子或终态粒子中包含全同费米子，以自由端的奇数次交换相区别的图形必然有相反的符号.

图中实线的不间断序列构成一条箭头保持连续方向的电子线. 这样的一条线或者有两个自由端，或者形成闭合回线. 例如，图形

$$(\bar{\psi}A\psi)(\bar{\psi}A\psi) = - - - \bigcirc - - -$$

是具有两个顶点的一条回线. 电子线方向不变是电荷守恒的图形表达："进入"每个顶点的电荷等于从该顶点"出去"的电荷.

连续电子线上双旋量指标的排列，相当于将逆箭头方向移动时遇到的矩阵自左至右写出来. 不同电子线的双旋量指标绝不会弄乱. 沿一条非闭合线，指标序列终止于具有电子(或正电子) 波函数的自由端. 在一条闭合回线上，指标序列本身是闭合的，即回线相当于它上面的矩阵乘积之迹. 不难看出，此迹必须冠以负号.

实际上，具有 $k$ 个顶点的一条回线对应着一组 $k$ 个收缩

$$(\bar{\psi}A\psi)(\bar{\psi}A\psi)\ldots(\bar{\psi}A\psi)$$

(或等效的另一组,差别仅仅是交换了顶点). 在第$(k-1)$ 个收缩中,算符 $\hat{\psi}$ 和 $\hat{\bar{\psi}}$ 以它们在电子传播函数中的次序($\hat{\bar{\psi}}$ 在 $\hat{\psi}$ 的右边)排列在一起. 两头的算符可通过与其它 $\psi$ 算符的偶数次交换移在一起,按次序$\hat{\bar{\psi}}\hat{\psi}$ 排列.

由于

$$\langle 0|T\bar{\psi}'\psi|0\rangle=-\langle 0|T\psi\bar{\psi}'|0\rangle$$

(参看347页的第二个注解),用相应的传播函数取代这一收缩,就意味着整个表达式改变符号.

一般来说,过渡到动量表象的方法和§73,§74中完全类似. 除了一般的四维动量守恒定律外,在每一个顶点上也必须遵守"守恒定律". 然而要唯一地确定图形中所有内线的动量,上述这些定律还是不够的. 在这种情况下,仍需通过 $d^4p/(2\pi)^4$ 对所有不确定的内部动量积分. 积分在整个 $p$ 空间进行,其中 $dp_0$ 从$-\infty$ 到$+\infty$.

在上面的讨论中,我们认为微扰是由"主动"参加反应的粒子(即过程中状态改变的粒子)间的相互作用表示的. 对于存在一个外电磁场的情形(即存在由反应过程中状态不改变的"被动"粒子产生的场),可以给出一个类似的方法.

设外场的四维势为 $A^{(e)}(x)$. 它以 $\hat{A}+A^{(e)}$(乘以流算符$\hat{j}$)的形式与光子算符 $\hat{A}$ 一起出现在相互作用的拉格朗日量中. 由于 $A^{(e)}$ 不包含任何算符,它不能与别的算符收缩. 换句话说,在费曼图中只有外线和外场对应.

将 $A^{(e)}$表示成傅里叶积分:

$$A^{(e)}(x)=\int A^{(e)}(q)e^{-iqx}\frac{d^4q}{(2\pi)^4},$$
$$A^{(e)}(q)=\int A^{(e)}(x)e^{iqx}d^4x. \qquad (77.6)$$

在动量表象的矩阵元表达式中，四维动量 $q$ 与代表真实粒子的其它外线的四维动量一起出现. 每一条这样的外场线可与一个因子 $A^{(e)}(q)$ 相关联，并且该线被看成"进入"线——与因子 $e^{-iqx}$ 中指数的符号相对应[在傅里叶积分中，$e^{-iqx}$ 总伴随着 $A^{(e)}(q)$ 出现]; "离去"线与因子 $A^{(e)*}(q)$ 相关联. 如果用四维动量守恒定律不能唯一地确定所有外场线的四维动量（已知所有实粒子的四维动量），那么尚须通过 $d^4q/(2\pi)^4$ 对所有"自由的" $q$ 积分，而且对所有其它未确定的图形线的四维动量积分.

如果外场与时间无关，那么

$$A^{(e)}(q)=2\pi\delta(q^0)A^{(e)}(\boldsymbol{q}) \tag{77.7}$$

式中 $A^{(e)}(\boldsymbol{q})$ 为三维傅里叶分量:

$$A^{(e)}(\boldsymbol{q})=\int A^{(e)}(\boldsymbol{r})e^{-i\boldsymbol{q}\cdot\boldsymbol{r}}d^3x. \tag{77.8}$$

在这种情况下，外线与因子 $A^{(e)}(\boldsymbol{q})$ 相关联，且赋予它四维动量 $q^\mu=(0,\boldsymbol{q})$; 与场线一起相交于一个顶点的电子线的能量因守恒定律而相等. 还需要通过 $d^3p/(2\pi)^3$ 对内线的其它未确定的三维动量 $\boldsymbol{p}$ 积分. 例如，这样算得的振幅 $M_{fi}$ 可以通过 (64.25) 决定散射截面.

我们来列出**图形方法**的最后规则，从而可以得到动量表象中散射振幅（或更确切地说，$iM_{fi}$）的表达式:

(1) 微扰论的第 $n$ 级近似对应着有 $n$ 个顶点的图形. 每一个顶点是一条进入的和一条离去的电子线（实线）与一条光子线（虚线）的会合点. 散射过程的振幅中包括自由端（外线）的数目等于初、终态粒子数的所有图形.

(2) 每一条进入的实外线与一个初态电子的振幅 $u(p)$ 或一个终态正电子的振幅 $u(-p)$ 相联系（$p$ 是粒子的四维动量）. 每一条离去的实线与一个终态电子的振幅 $\bar{u}(p)$ 或一个初态正电子的

振幅 $\bar{u}(-p)$ 相关.

(3) 每一个顶点与一个四维矢量 $-ie\gamma^{\mu}$ 相关.

(4) 每一条进入的虚外线与一个初态光子的振幅 $\sqrt{4\pi}\,e_{\mu}$ 相关，而每一条离去的虚外线与一个终态光子的振幅 $\sqrt{4\pi}\,e_{\mu}^{*}$ 相关，$e$ 为四维极化矢量. 这个矢量的指标 $\mu$ 与对应顶点的矩阵 $\gamma^{\mu}$ 的指标相同(因而有标量积 $\gamma e$ 或 $\gamma e^{*}$).

(5) 每一条实内线与因子 $iG(p)$ 相关. 每一条虚内线与因子 $-iD_{\mu\nu}(p)$ 相关. 张量指标 $\mu$, $\nu$ 与虚线所连接的两个顶点的矩阵 $\gamma^{\mu}$, $\gamma^{\nu}$ 的指标相同.

(6) 沿着电子线的任一连续序列，箭头方向保持不变，且双旋量指标的配置相应于按这样的顺序自左至右写出矩阵，即逆着箭头方向移动时，将顺序地遇到这些矩阵. 一条闭合的电子线相应于它上面的所有矩阵相乘的迹.

(7) 相交于每个顶点的线的四维动量满足一条守恒定律，即进入线的动量之和等于离去线的动量之和. 自由端的动量是已知量(服从一般的守恒定律)，且赋予正电子线以动量 $-p$. 对每个顶点应用守恒定律后仍不能确定的内线的动量，还应该对 $d^4p/(2\pi)^4$ 进行积分.

(8) 一个与外场相对应的自由进入端与因子 $A^{(e)}(q)$ 相关. 四维动量 $q$ 通过顶点上的守恒定律与其它线的四维动量相关. 如果场与时间无关，则自由端与因子 $A^{(e)}(\boldsymbol{q})$ 相关. 对尚不确定的内线的三维动量，还应该对 $d^3p/(2\pi)^3$ 进行积分.

(9) 对图形中的每一条闭合的电子回线和每一对正电子外线(如果这些外线是单一实线序列的始端和终端)，$iM_{fi}$ 的表达式中都有一个附加因子 $-1$. 如果初态粒子或终态粒子包含一个以上的电子或正电子，那么交换奇数次全同粒子(即与之相应的外线交换奇数次)会引进一个负号.

为阐明最后一条规则，我们附带说一句：具有相同实线的图形(即除去光子线后是全同的图形)，其符号必然相同. 还应当注意：如果有全同的费米子，则振幅的总符号是任意的.

## §78. 交叉不变性

由费曼积分所表示的散射振幅 $M_{fi}$ 显示出如下值得注意的对称性质.

费曼图中任一进入的外线可以看成一个初态粒子或一个终态反粒子(不改变箭头方向)；而任一离去线可以看成一个终态粒子或一个初态反粒子. 从粒子变成反粒子时，该线所代表的四维动量 $p$ 的意义也发生了变化：例如，对电子 $p=p_e$，对正电子 $p=-p_p$. 对粒子所赋予的极化也发生了变化. 由于进入的外线必定对应于振幅 $u$，离去线对应于 $u^*$，因而对电子 $u=u_e$，而对正电子 $u=u_p^*$. 从 $u$ 到 $u^*$ 的变化意味着粒子的自旋分量(或螺旋性)变号.

对于真实中性粒子光子来说，外线意义的变化不过是从发射光子变成吸收光子，反之亦然：动量为 $k$ 的一条光子外线或对应于吸收一个动量为 $k_{吸收}=k$ 的光子，或对应于发射一个动量为 $k_{发射}=-k$ 且螺旋性相反的光子.

外线含义的这种改变等价于从一个交叉反应通道变到其它通道. 由此可见，作为图形自由端的动量的函数，同一振幅描述了该反应的所有通道①. 只有函数宗量的含义随通道而变：从粒子变成反粒子意味着 $p_i\to p_f$，这里 $p_i$ 是初态粒子的四维动量(在一个通道)，而 $p_f$ 是终态粒子的四维动量(在另一通道). 散射振幅的这种性质称为**交叉对称性**或**交叉不变性**.

---

① 如果某一特定通道为四维动量守恒定律所禁阻，那么，作为公共因子出现在式(64.5)中的 $\delta$ 函数将使该跃迁几率一定为零.

把不变性振幅定义为运动学不变量的函数. 根据 § 70 可以这样说，这些函数对所有通道将是相同的，但对每一通道来说，它们的宗量将在相应的物理区域内取值. 换句话说，费曼积分确定不变积分为解析函数；在不同的物理区域内它们的值是在一个区域确定的函数的解析延拓. 因为费曼积分的被积函数有奇点，所以不变振幅也有奇点. 这些奇点可以应用避开极点的规则由费曼积分的表达式确定. 如果对任意一个通道从费曼积分算得不变振幅，向其它通道的解析延拓必须考虑这些奇点.

应该强调的是，交叉不变性超过了由时空对称性的普遍要求得到的散射矩阵的性质. 后者意味着初态和终态交换、将所有粒子换成反粒子（所有粒子的动量 $p$ 不变而它们的角动量分量变号)时，过程的振幅不变. 这是 $CPT$ 不变性的要求[1]. 然而，交叉不变性不仅允许同时对所有粒子做这种变换，而且允许对任意一个粒子单独地做这种变换.

## §79. 虚粒子

费曼图中的内线在协变微扰论中所起的作用类似于“普通”理论中的中间态，但是，这些中间态的本性在两种理论中是不一样的. 在普通理论中的中间态，(三维）动量是守恒的，而能量不守恒. 正是在这个意义上，这些中间态被看作是**虚状态**. 在协变性理论中，动量和能量是平等的：中间态四维动量的各分量都守恒（这是由于 $S$ 矩阵元中的积分既对坐标进行，又对时间进行，从而保证了理论的协变性）. 不过，对实粒子成立且由 $p^2=m^2$ 表达的能量和动量之间的关系，在中间态不再成立. 因而这些中间态被称为中间**虚粒子**. 虚粒子的动量和能量之间的关系是任意的，它

[1] 应当注意，改变费曼图中所有四维动量的符号，从上述的一种反应变成另一种. 这种形式描写的意义相当于作为四维反演的 $CPT$ 变换.

可以是顶点处四维动量守恒所要求的任何东西.

让我们来考虑这样一个图形：它由 I 和 II 两部分组成，这两部分由一条单线连结. 不考虑这两部分的内部结构，我们可以把这个图形表示成如下形式

$$\text{(I)}\overset{p}{\text{——}}\text{(II)} \tag{79.1}$$

(每一条线可以是实线，也可以是虚线). 根据普遍的守恒定律，外线的四维动量之和对部分 I 和部分 II 是相等的. 由于在每个顶点处守恒，这些和也等于连结 I 与 II 的内线的四维动量. 换句话说，这个动量是唯一确定的，因而在矩阵元中没有对它的积分.

量 $p^2$ 可能为正，也可能为负，视反应通道而定. 总有这样一个通道，其中 $p^2>0$①. 这时，就其形式上的性质来讲，虚粒子与一个具有实质量 $M=\sqrt{p^2}$ 的真粒子完全类似，可以定义它的静止参考系，可以确定它的自旋，等等.

光子传播函数(76.11)的张量结构同于一个自旋为 1 的、质量不为零的非极化粒子的密度矩阵的张量结构：

$$\rho_{\mu\nu}=-\frac{1}{3}\left(g_{\mu\nu}-\frac{p_\mu p_\nu}{m^2}\right)$$

[参看(14.15)]. 另一方面，对一个虚粒子来说，传播函数(由场算符的二次式组成的量)的作用与一个真粒子的密度矩阵相类似. 所以，和实光子一样，必须赋予虚光子以自旋 1. 然而，和具有两个独立极化的实光子不同，作为一个有限质量的“粒子”，虚光子可以有三种极化.

电子的传播函数是

① 例如，有这样一个通道(如果它在能量上是容许的)，其中部分 I 的所有自由端对应初态粒子，而部分 II 的所有自由端对应终态粒子. 这时，$p=P_i$(所有初态粒子四维动量之和)，在质心坐标系中，$p=(P_i^0,0)$，因而 $p^2>0$.

$$G\propto\gamma p+m.$$

此处$m$是实电子的质量，而虚粒子的"质量"为$M=\sqrt{p^2}$. 令

$$\gamma p+m=\frac{M+m}{2M}(\gamma p+M)+\frac{M-m}{2m}(\gamma p-M), \quad (79.2)$$

我们看到，第一项相当于一个质量为$M$、自旋为1/2的粒子的密度矩阵，第二项与一个类似的"反粒子"的密度矩阵相当[比较(29.10)和(29.17)]. 由于粒子和反粒子有不同的内禀宇称(§27)，我们得出结论：必须赋予虚电子以同样的1/2自旋，但不能赋予它确定的宇称.

图形(79.1)的显著特点是，只要切断一条内线，就可把它分成互不相连的两个部分①. 在这种情况下，这条线对应着一个单粒子中间态，也就是说，与仅有一个虚粒子的态对应. 和这样一个图形对应的散射振幅包含着一个特征因子(它毋须积分！)

$$\frac{1}{p^2-m^2+i0},$$

这个特征因子是由内线$p$产生的(对电子线，$m$为电子质量；对光子线，$m=0$). 换句话说，在$p$的取值使得虚粒子变成真实粒子处($p^2=m^2$)，散射振幅有极点. 在非相对论量子力学中，也有与此类似的情形：当能量值与碰撞粒子系统的束缚态相对应时，散射振幅有极点(第三卷§128).

让我们来研究(79.1)这种反应通道的图形，即：所有右边的自由端对应于初态粒子，所有左边的自由端对应于终态粒子，并且$p^2>0$. 此时我们可以说，在中间态，初态粒子系统转化成一个虚粒子. 只有当这种转化不与必要的守恒定律(不包括四维动量守恒)相抵触时，这才是可能的. 也就是说，在这种转化中，角动量、电荷、电荷宇称等等都是守恒的. 这是出现所谓**极点图形**的必要条

① 第一级非零近似中几乎所有过程的图形都有这种性质.

件．如果这些条件对一个反应通道存在，由于交叉不变性的缘故，对其余通道也存在．

例如，所说的守恒定律不排除按照 $e+\gamma\to e$ 产生一个虚电子．这对应于康普顿效应振幅的一个极点（因而也对应于这个反应的其它通道的一个极点，即电子-正电子对的双光子湮灭）．按照 $e^-+e^+\to\gamma$ 产生一个虚光子，对应于一个电子被一个正电子散射的振幅的一个极点，因而也是电子-电子散射的振幅的一个极点．两个光子既不能转化成一个虚电子，也不能转化成一个虚光子：电荷守恒和角动量守恒禁止 $\gamma+\gamma\to e$，电荷宇称守恒禁止 $\gamma+\gamma\to\gamma$．因而，光子-光子散射振幅不可能有极点图形．

上面我们基于费曼积分所讨论的散射振幅极点奇性的根源，实际上具有更为普遍的性质，而与微扰论无关．我们将会看到，这种奇性仅仅作为么正性条件(71.2)的结果而出现．

我们假定，式(71.2)中出现的中间态 $n$ 包含一个单粒子状态．这个状态的贡献是

$$(T_{fi}-T^*_{if})^{(单粒子)}=\mathrm{i}(2\pi)^4\sum_\lambda\int\delta^{(4)}(P_f-p)T_{fn}T^*_{in}\frac{V\mathrm{d}^3p}{(2\pi)^3},$$

式中 $p$ 和 $\lambda$ 是中间粒子的四维动量和螺旋性．对 $\mathrm{d}^3p$ 的积分由对 $\mathrm{d}^4p$ 的积分（在 $p^0\equiv\varepsilon>0$ 的区域）代替：

$$\mathrm{d}^3p\to2\varepsilon\delta(p^2-M^2)\mathrm{d}^4p$$

（$M$ 是中间粒子的质量）．积分消去 $\delta$ 函数 $\delta^{(4)}(P_f-p)$，然后根据(64.10)从振幅 $T_{fi}$ 变到 $M_{fi}$，我们得到

$$(M_{fi}-M^*_{if})^{(单粒子)}=2\pi\mathrm{i}\delta(p^2-M^2)\sum_\lambda M_{fn}M^*_{in}. \quad (79.3)$$

若假定 $T$ 和 $P$ 的不变性，我们就有 $M_{if}=M_{f'i'}$（相差一个相因子）．在具有相同动量的条件下，状态 $i',f'$ 与状态 $i$，$f$ 的区别仅在于粒子螺旋性的符号．将方程(79.3)和 $M_{f'i'}-M^*_{i'f'}$ 的相应方程相

加，我们有

$$\mathrm{Im}\overline{M}_{fi}^{(单粒子)}=-\pi\delta(p^2-M^2)R, \tag{79.4}$$

其中

$$\overline{M}_{fi}=M_{fi}+M_{f'i'},$$

$$R=-\sum(M_{fn}M_{in}^*+M_{f'n}M_{i'n}^*).$$

由此得出，$\overline{M}_{fi}$ 作为 $p^2=P_i^2=P_f^2$ 的解析函数，在 $p^2=M^2$ 处有一极点．按照式(75.18)，极点部分为

$$\overline{M}_{fi}^{(单粒子)}=\frac{R}{p^2-M^2+\mathrm{i}0}. \tag{79.5}$$

实际跃迁到一个单粒子态只有对 $P_i^2=P_f^2$ 的一个值即 $M^2$ 才是可能的．这样，我们事实上得到了一个与形如(79.1)的图形相对应的散射振幅结构．

最后，我们来研究包含闭合电子回线的图形的一个重要性质．这一性质通过对虚光子应用电荷宇称的概念很容易推导出来：和实光子一样，必须赋予虚光子以确定的(负的)电荷宇称①．

如果一个图形包含一条封闭回线(顶点数 $N>2$)，那么该过程的振幅除了包括这个图形外，还一定包括着另一个图形，两个图形的区别仅仅是回线的绕行方向不同(若 $N=2$，显然就谈不到绕行方向的问题)．如果"切断"从这些回线引出的虚线，从而把这些回线分出来，我们将得到两个回线 $\Pi_{\mathrm{I}}$ 和 $\Pi_{\mathrm{II}}$：

$\Pi_{\mathrm{I}}$　　　$\Pi_{\mathrm{II}}$　　　(79.6)

可以认为它们决定着一组光子(实光子或虚光子)转换成另一组光

① 从§13中对实光子给出的关于作用在每个顶点上的电磁相互作用算符的论证，可以得出这一点．

子的过程的振幅；$N$是初态光子数和终态光子数之和．但是，电荷宇称守恒禁止偶数个光子转换为奇数个光子．因此，当$N$是奇数时，与回线(79.6)对应的表达式的和必定为零．结果，以这些回线为其组成部分的两个图形对散射振幅的总贡献也为零．这一结果被称为法雷定理(W. H. Furry, 1937).

这样，在构造某一过程的振幅时，我们可以完全不去理会包含奇数个顶点的回线的那些图形．

让我们更为详尽地考查一下所以能这样做的根据．一条闭合的电子回线对应于一个表达式（光子线的动量$k_1, k_2, \cdots, k_N$为已知）

$$\int d^4p \mathrm{Sp}[(\gamma e_1)G(p)(\gamma e_2)G(p+k_1)\cdots], \tag{79.7}$$

式中$p, p+k_1, \cdots$是电子线的动量（在考虑了各顶点上的守恒定律后，这些动量仍然不能完全确定）．对所有矩阵$\gamma^\mu$和$G$进行电荷共轭运算，即用$U_c^{-1}\gamma^\mu U_c$和$U_c^{-1}GU_c$替换$\gamma^\mu$和$G$．由于矩阵乘积之迹不受这种变换的影响，表达式(79.7)不会改变．另一方面，按照式(26.3)，

$$U_c^{-1}\gamma^\mu U_c = -\tilde{\gamma}^\mu, \tag{79.8}$$

因而

$$U_c^{-1}G(p)U_c = \frac{-p\tilde{\gamma}+m}{p^2-m^2} = \tilde{G}(-p). \tag{79.9}$$

但是，用符号改变了的$p$的转置矩阵代替$G(p)$，显然等效于改变回线的绕行方向，即所有箭头反向．于是，这个变换使一个回线变成另一个，且从每个顶点上的代换(79.8)得出一个因子$(-1)^N$．因而

$$\Pi_{\mathrm{I}} = (-1)^N \Pi_{\mathrm{II}}, \tag{79.10}$$

这就是说，当顶点数是偶数时，两个回线的贡献是相同的；当顶点数为奇数时，两个回线的贡献是相反的（相差一个负号）．

现在把最终公式改写一下，取某个固定的道为输入道①. 该道的分宽度记作$\Gamma_e$(**弹性宽度**)其它反应道的宽度记作$\Gamma_{r1}, \Gamma_{r2}, \cdots$.

弹性散射总振幅为

$$f_e(\theta)=f^{(0)}(\theta)-\frac{2l+1}{2k}\frac{\Gamma_e}{E-E_0+\frac{1}{2}i\Gamma}e^{2i\delta_l^{(0)}}P_l(\cos\theta), \tag{145.9}$$

式中$k$是入射粒子的波数，$f^{(0)}$是势散射振幅. 此式和(134.12)式的区别在于共振项分子中的$\Gamma$换成了较小的$\Gamma_e$.

早已提过非弹性过程的振幅是纯共振型的. 微分截面为

$$d\sigma_{ra}=\frac{(2l+1)^2}{4k^2}\frac{\Gamma_e\Gamma_{ra}}{(E-E_0)^2+\frac{1}{4}\Gamma^2}[P_l(\cos\theta)]^2, \tag{145.10}$$

积分截面为

$$\sigma_{ra}=(2l+1)\frac{\pi}{k^2}\frac{\Gamma_e\Gamma_{ra}}{(E-E_0)^2+\frac{1}{4}\Gamma^2}. \tag{145.11}$$

所有非弹性过程的总截面为

$$\sigma_r=(2l+1)\frac{\pi}{k^2}\frac{\Gamma_e\Gamma_r}{(E-E_0)^2+\frac{1}{4}\Gamma^2}, \tag{145.12}$$

其中$\Gamma_r=\Gamma-\Gamma_e$称为该能级的总**非弹性宽度**.

还想知道的是反应截面在共振值$E=E_0$附近的能量范围内的积分结果. 由于$\sigma_r$离开共振时衰减得很快，对$E-E_0$的积分可以延伸为$-\infty$到$+\infty$，求得

$$\int\sigma_r dE=(2l+1)\frac{2\pi^2}{k^2}\frac{\Gamma_e\Gamma_r}{\Gamma}. \tag{145.13}$$

在慢中子散射中(它的波长远大于原子核的线度)，只有$s$波散射是重要的，它的势散射振幅是一个实常数$-\alpha$. (134.14)变

① 这些公式首先由布赖特和维格纳得到(G. Breit and E. Wigner, 1936).

成

$$f_e=-\alpha-\frac{\Gamma_e}{2k\left(E-E_0+\frac{1}{2}i\Gamma\right)}. \qquad (145.14)$$

弹性散射总截面为

$$\sigma_e=4\pi\alpha^2+\frac{\pi}{k^2}\frac{\Gamma_e^2+4\alpha k\Gamma_e(E-E_0)}{(E-E_0)^2+\frac{1}{4}\Gamma^2}. \qquad (145.15)$$

$4\pi\alpha^2$这一项可以称为**势散射截面**. 我们看到共振区内存在着势散射和共振散射的干涉. 只有在该能级的邻近($E-E_0\sim\Gamma$)才能略去振幅$\alpha$(记得$|\alpha k|\ll1$), 此时的慢中子弹性散射截面公式变成

$$\sigma_e=\frac{\pi}{k^2}\frac{\Gamma_e^2}{(E-E_0)^2+\frac{1}{4}\Gamma^2}. \qquad (145.16)$$

弹性和非弹性散射的总截面为

$$\sigma_t=\sigma_e+\sigma_r=\frac{\pi}{k^2}\frac{\Gamma_e\Gamma}{(E-E_0)^2+\frac{1}{4}\Gamma^2}. \qquad (145.17)$$

当势散射可忽略时, 截面$\sigma_e$, $\sigma_{ra}$可表成以下形式:

$$\sigma_e=\sigma_t\frac{\Gamma_e}{\Gamma}, \qquad \sigma_{ra}=\sigma_t\frac{\Gamma_{ra}}{\Gamma}.$$

$\sigma_t$是所有共振过程的截面之和, 可以看作是复合核的形成截面. 各种弹性和非弹性过程的截面, 等于$\sigma_t$乘以复合核蜕变为该道的相对几率, 后者是能级总宽度和相应分宽度的比值. 截面的这种表述方式, 完全是由于散射振幅分子中的系数$M_{ab}$能够进行因式分解的结果, 它相当于这样的物理图象, 该碰撞过程可分两步实现: 先形成处于某一准分立态中的复合核, 然后通过某一个道

蜕变①.

正如§134中早已提到的，此处所讨论公式的适用范围只受到一个条件的限制，即差值$|E-E_0|$必须小于该复合核两个(具有相同的角动量值)相邻准分立能级的间距$D$. 我们还提到过，如果$E=0$值位于共振区内，上述这些公式不允许过渡到$E\to 0$的极限. 在这种情形下公式应作修改，即把能量$E_0$改成某个有关的常数$\epsilon_0$，把弹性宽度$\Gamma_e$改成$\gamma_e\sqrt{E}$，非弹性宽度$\Gamma_r$仍应看作常数(H. A. Bethe and G. Placzek, 1937)②. 这些修改使得当$E\to 0$时，非弹性截面(145.12)按$1/\sqrt{E}$增长，与慢粒子非弹性散射的普遍理论相一致(§143).

当考虑相碰粒子的自旋以后，公式一般讲来非常复杂. 我们只考虑最简单的但是比较重要的慢中子散射情形，参与散射的只有$l=0$的轨道角动量. 复合核的自旋由靶核的自旋$i$和中子的自旋$s=\frac{1}{2}$相加而得，它可取$j=i\pm\frac{1}{2}$两个值(我们假定$i\neq 0$，否则公式不需改变). 复合核的每个准分立能级和一个确定的$j$值相联系，因此反应截面等于(145.12)式(取$l=0$)乘以几率$g(j)$，$g(j)$就是当有一个共振能级存在时原子核加中子这个系统具有必要的$j$值的几率.

我们假定中子和靶核的自旋取向都是完全任意的，对$\mathbf{i}$和$\mathbf{s}$这一对自旋讲来，共有$(2i+1)(2s+1)=2(2i+1)$种可能的取向.

---

① 所有以上的计算都是以$a+X=b+Y$型的反应为基础的，从两个初始粒子(入射粒子和核)出发变成两个粒子. 但从所得结果的物理本质可以看出，这样的假定并不是必需的. (145.11)那样的积分截面式对原子核中逸出多个粒子的反应讲来也是成立的.

② 要注意的是，对于小能量情形下可能发生的那些非弹性过程讲来(例如辐射俘获)，$E=0$值不是一个阈值. 当能量接近于该反应的阈值时(低于阈值该反应不会发生)，分宽度$\Gamma_{ra}$应作$\Gamma_e$所作的那种修改.

其中有 $2j+1$ 种取向对应于给定的总角动量值 $j$，假定所有的空间取向都是等几率的，我们求得具有给定 $j$ 值的几率为

$$g(j)=\frac{2j+1}{2(2i+1)}. \tag{145.18}$$

弹性散射的截面公式也应作同样的修改，但应记得势散射中这两个 $j$ 值全都存在，因此(145.15)式的第二项中应该包含一个 $g(j)$ 因子($j$ 为该共振能级的总角动量)，$4\pi\alpha^2$ 这一项应改为求和式：

$$\sum_j g(j)\,4\pi\left[\alpha^{(j)}\right]^2.$$

共振反应通过复合核的形成阶段(处于某一准定态中)这一事实，导致有关反应产物角分布问题的某些一般性结论，每个准定态(除了其它特性以外)具有一定的宇称．因而这个复合核蜕变后形成的 $b+Y$ 粒子系统也有同样的宇称．这意味着该系统的波函数及其反应振幅当坐标系反演后只是乘上了一个 $\pm1$ 因子；振幅的平方即截面因而保持不变．坐标系的反演对确定散射方向的极角和方位角讲来意味着作变换 $\theta\to\pi-\theta$, $\varphi\to\pi+\varphi$(在系统的质心系中)．反应产物的角分布因而对这个变换保持不变，特别是，当我们对参与反应的所有粒子的自旋取向平均以后，截面只和散射角 $\theta$ 有关，对这个角而言的角分布必然对称于变换 $\theta\to\pi-\theta$，也就是角分布(在质心系中)对称于粒子碰撞方向的垂直平面①．

鉴于复合核具有大量密集的能级，截面随能量的具体变化对许多散射过程说来极为复杂，这种复杂性造成了一个困难，使我们难于发现从一个核到另一个核时截面性质的任何系统性变化．因此我们就有理由去研究抛开共振结构细节的那种截面行为，也就

---

① 对于无自旋粒子，微分反应截面简单地正比于 $[P_l(\cos\theta)]^2$，这种对称性很明显．

是对远大于能级间距的能量间隔进行平均以后的截面行为. 这样的处理也不必区分不同类型的非弹性过程. 只把散射分为“弹性”和“非弹性”部分(其含义见后)①.

为了说明平均过程的含义,我们仍略去与自旋有关的复杂性,来考虑 $l=0$ 的分波截面.

按照(142.7)式,

$$\left.\begin{aligned}&\sigma_e=\frac{\pi}{k^2}|S-1|^2,\quad \sigma_r=\frac{\pi}{k^2}(1-|S|^2),\\&\sigma_t=\frac{\pi}{k^2}2(1-\mathrm{Re}S)\end{aligned}\right\}\qquad(145.19)$$

弹性和非弹性截面以及由此而得的总截面通过同一个量 $S$ (为简洁计省略了指标(0))表达出来. 对能量间隔求平均时, 与 $S$ 成线性关系的总截面可以通过 $S$ 的平均值表成

$$\bar{\sigma}_t=\frac{\pi}{k^2}2(1-\mathrm{Re}\bar{S}),\qquad(145.20)$$

$1/k^2$ 因子变化缓慢, 不受平均的影响, 平均以后的“弹性”截面被定义成为

$$\bar{\sigma}_e^*=\frac{\pi}{k^2}|\bar{S}-1|^2,\qquad(145.21)$$

它一般地不等于平均值 $\bar{\sigma}_e$, 换句话说, 这样的弹性散射是先对出射波 $Se^{ikr}/r$ 中的振幅平均以后再来定义的、采用这个定义, 一个波包的弹性散射保持它的形状不变. 我们可以说, (145.21)式的截面与散射的“相干”部分有关. 这就意味着, 通过形成复合核而发生的那一部分弹性散射被排除在外: 当一长寿命的复合核已经形成随后又蜕变时, 入射波包的特征当然全都丧失. 这个平均化模型中的“非弹性”散射现在自然是由差值 $\bar{\sigma}_a^*=\bar{\sigma}_t-\bar{\sigma}_e^*$ 来定义, 即

① 以下的平均方法(进展到所谓核散射的光学模型)是由 V. F. Weisskopf, C. E. Porter. and H. Feshbach (1954)提出的.

$$\bar{\sigma}_a^{\text{光}}=\frac{\pi}{k^2}(1-|\bar{S}|^2). \tag{145.22}$$

因此其中不但包括各种非弹性过程，也还包括形成中间复合核而发生的那一部分弹性散射.

很易看出，这种解释给出了极限情形的正确处理，因而可以进行合理的内插.

在低能范围内，共振之间分得很开($\Gamma\ll D$)，每个能级附近的 $S$ 值由下式给出:

$$S=e^{2i\delta^{(0)}}\left(1-\frac{i\Gamma_e}{E-E_0+\frac{1}{2}i\Gamma}\right),$$

平均后得

$$\bar{S}=e^{2i\delta^{(0)}}\left(1-\frac{\pi\overline{\Gamma}_e}{D}\right) \tag{145.23}$$

其中 $\overline{\Gamma}_e$ 和 $D$ 是对所考虑能量范围内所有的能级平均以后所得的弹性宽度和平均能级间距，缓变函数 $\delta^{(0)}(E)$ 在这个平均中可看作一个常数. 从而得

$$\bar{\sigma}_a^{\text{光}}=\frac{\pi}{k^2}\frac{2\pi\overline{\Gamma}_e}{D}, \tag{145.24}$$

式中已略去 $\sim\Gamma/D$ 的小项①. 此式实际上和截面 (145.17) 的平均值一致，如前所述，它对应于复合核的形成.

随着复合核激发能量的增大，能级间距减小，蜕变几率(以及能级的总宽度)增大，以致能级开始交叠 (此时准分立能级这一概念本身也在很大程度上失去它的意义). 函数 $S(E)$ 的不规则性就逐渐平滑下去，使得精确函数和平均函数的差别逐渐变小，截面式(145.22)就和(145.19) 式给出的 $\sigma_r$ 相同. 这一点与下列事实一

① 由于其它能级的存在而在一个能级的范围内所产生的那些项，都具有同样的数量级.

致，高能时复合核通过输入道而蜕变与该能量下可能发生的各种蜕变方式比较起来是不重要的．因此在这个能量范围内，所有参与形成复合核的过程都可以看作是非弹性的．

由此可见，平均模型中的散射还是能用一个量 $\bar{S}$ 来确定，现在 $\bar{S}$ 是能量的光滑函数．在**光学模型**中，为了算出这个函数，原子核的散射特性用一个具有复势的力场来近似．该势的虚部使其结果除弹性散射外还有粒子的吸收，这种吸收相当于平均模型中的“非弹性”散射，其截面由(145.22)式给出．

## §146 反应中的末态相互作用

反应结果所产生的粒子之间的相互作用，可以对它们的能量分布和角分布产生重要的影响．而这种效应，当相互作用粒子的相对速度很小时自然特别明显．例如在伴有两个或更多个核子辐射的核反应中，就存在着这种现象，在这里效应来自自由核子之间的核力作用①．

设 $\mathbf{p}_0$ 为逸出核子对的质心动量，$\mathbf{p}$ 为它们的相对动量．我们假定 $p \ll p_0$，因而相对动能 $E=p^2/m$（$m$ 为核子质量）远小于质心动能 $E_0=p_0^2/4m$．我们还假定 $E_0$ 远大于双核子系统的(真的或虚的)能级 $\epsilon$．这就是说，仅假定核子间的相对运动是“慢”的，而核子本身的运动都是“快”的．

反应几率是和处于“反应带”内的生成粒子的波函数模量平方成正比的，这个“带”内的粒子间距具有核力力程 $a$ 的数量级（见§134 中对于初始粒子的类似讨论）．在目前情形下，我们的目的只是求出反应几率和一对核子的相对运动特性之间的关系．因此

① 下述结果先由 A. B. Migdal(1950)得到，后由K. M. Watson(1952)独立地得到．

只需考虑相对运动波函数 $\psi_{\mathbf{p}}(\mathbf{r})$ 就足够了，生成一对相对动量在 $d^3p$ 区间内的核子的几率为

$$dw_{\mathbf{p}} = \text{常数} \times |\psi_{\mathbf{p}}(a)|^2 d^3p, \tag{146.1}$$

§136 中曾经指出过，为了求出一个系统通过散射进入具有确定运动方向的状态的几率，我们应该采用(在无穷远处)只含入射波和一个平面波的末态波函 $\psi_{\mathbf{p}}^{(-)}$ 作为波函数，这些函数应按动量的 $\delta$ 函数归一化. $\psi_{\mathbf{p}}^{(-)}$ 函数也可从 $\psi_{\mathbf{p}}^{(+)}$ 函数直接得到(取复共轭并改变 $\mathbf{p}$ 的符号)，$\psi_{\mathbf{p}}^{(+)}$ (在无穷远处) 含有出射球面波与两粒子的相互散射相当. 代入(146.1)时两者的差别并不重要，即(146.1)中的 $\psi_{\mathbf{p}}$ 可以取作 $\psi_{\mathbf{p}}^{(+)}$，于是问题就化为早已讨论过的慢粒子共振散射.

$\psi_{\mathbf{p}}$函数在 $r\sim a$ 区域内的具体形状尽管是不知道的，为了求出几率和能量$E$的关系，我们只需考虑 $r\lesssim 1/k\gg a$ 距离处的这个函数(式中的 $\mathbf{k}=\mathbf{p}/\hbar$; 已假定 $ka\ll 1$)，然后把它延伸到距离 $r\sim a$ 处就足够了①. $\psi_{\mathbf{p}}$的主要贡献来自球面波(含有 $1/r$ 因子)，这个波等于一组 $l$ 值不同的分波，它们的振幅就是相应的散射振幅. 由于低能时 $l\neq 0$ 的散射振幅比较小，求$|\psi_{\mathbf{p}}(a)|^2$ 时只需考虑 $s$ 波. 因此根据(133.7)式有

$$\psi_{\mathbf{p}} \sim \frac{1}{\kappa + ik}\frac{e^{ikr}}{r}, \tag{146.2}$$

其中 $\kappa = \sqrt{2m|\epsilon|}/\hbar$，而 $\epsilon$ 为双核子系统的束缚(或虚)态能量②. 上式代入(146.1)得

$$dw_{\mathbf{p}} = \text{常数} \times \frac{d^3p}{E+|\epsilon|}. \tag{146.3}$$

① 这样做是允许的，因为在 $r\ll 1/k$ 的区域内，确定 $\psi_{\mathbf{p}}$ 的薛定谔方程中可以略去能量$E$. 因此这个区域内 $\psi_{\mathbf{p}}$和$E$的关系完全决定于它和 $r\sim 1/k$ 区域内函数的"衔接"条件.

② 这里所指的是自旋平行或反平行的 $np$ 系统，或者是自旋反平行的 $nn$ 系统. 至于 $pp$ 系统，由于库仑斥力而使情况复杂化，此时要用 §138 中给出的理论来处理.

可见动量的方向分布(在双核子系统的质心系中)是各向同性的. 相对运动的能量分布由下式给出:

$$dw_E = 常数 \times \frac{\sqrt{E}\,dE}{E+|\epsilon|}. \tag{146.4}$$

我们看到,核子间的相互作用使得能量分布在低能区的 $E\sim|\epsilon|$ 处出现一个极大值.[①]

实验室坐标系中, 小的 $\theta$ 角(两粒子动量的夹角)对应于小的相对动量值 ($p\ll p_0$). 因此 $E$ 分布中存在着极大值, 对应于实验室坐标系中核子逸出方向间的角关联在小的 $\theta$ 值时出现增长的几率.

设 $\mathbf{p}_1$ 和 $\mathbf{p}_2$ 是实验室坐标系中两个核子的动量,则有

$$\mathbf{p}_0=\mathbf{p}_1+\mathbf{p}_2, \qquad \mathbf{p}=\frac{1}{2}(\mathbf{p}_2-\mathbf{p}_1)$$

$\left(两个相同粒子的折合质量为\frac{1}{2}m\right)$. 以上两式矢乘后得 $\mathbf{p}_0\times\mathbf{p}=\mathbf{p}_1\times\mathbf{p}_2$,故当 $p\ll p_0$ 时有

$$p_0p_\perp=p_1p_2\sin\theta\approx\frac{1}{4}p_0^2\theta,$$

或 $\theta=4p_\perp/p_0$, 其中 $p_\perp$是矢量 $\mathbf{p}$ 相对于 $\mathbf{p}_0$ 方向而言的横向分量, $\theta$ 是 $\mathbf{p}_1$ 和 $\mathbf{p}_2$ 方向间所夹的小角. 把(146.3)改写成以下形式:

$$dw_{\mathbf{p}}=常数\times\frac{2\pi p_\perp dp_\perp dp_\parallel}{(p_\perp^2+p_\parallel^2)\frac{1}{m}+|\epsilon|},$$

并对 $p_\parallel$积分, 即得对 $\theta$ 角而言的几率分布. 由于积分收敛很快, 积分限可延伸到从 $-\infty$到 $+\infty$, 最后结果为

---

① 严格讲来,(146.3)(146.4) 式中的常系数也可能依赖于$E$(通过整个反应产物系统的其余部分的波函数), 但是这样的依赖关系是很弱的: 这个系数作为$E$的函数,只有在该反应中核子对所能具有的整个能量范围内($\sim E_0$)才会有显著的变化, 因此对 $E\ll E_0$ 区间内的分布讲来,这种依赖关系与(146.4)式所示的强烈关系相比可以略去不计.

$$dw_\theta = 常数 \times \frac{\theta d\theta}{\sqrt{\theta^2 + 4|\epsilon|/E_0}}, \tag{146.5}$$

立体角元 $do \approx 2\pi\theta d\theta$ 的角分布在 $\theta \sim \sqrt{|\epsilon|/E_0}$ 处有一极大值.

## §147. 反应阈附近的截面行为

如果反应产物的内能之和超过了初始粒子的内能之和，这个反应就有一个阈：仅当碰撞粒子的动能(在质心系中) $E$ 超过某个一定的"阈"值 $E_t$ 时，这个反应才有可能发生. 我们来考察阈值附近的反应截面依赖于能量的特点. 我们假定反应产物只有两个粒子($A+B=A'+B'$ 型).

在阈的附近，生成粒子的相对速度 $v'$ 很小，这种反应与碰撞粒子速度很低的反应正好相反. 截面和 $v'$ 的关系因此很易通过(144.13)式的细致平衡原理以及反应的已知能量关系求出，而 $v'$ 是该式中输入道的速度(§143). 在很大一类反应中，$A'$ 和 $B'$ 粒子间不存在库仑作用(例如产生一个慢中子的核反应)，因而求得的反应截面与 $v'^2(1/v')$ 成正比①，即

$$\sigma_r \sim v' \tag{147.1}$$

同理我们求得截面和碰撞粒子能量的下列关系：速度 $v'$ 从而还有反应截面 $\sigma_r$ 与差值 $E-E_{阈}$ 的平方根成正比

$$\sigma_r = A\sqrt{E-E_{阈}} \tag{147.2}$$

不同道的散射振幅间由幺正条件联系. 因此打开一个新道也使其它过程的截面包括弹性散射截面在内的能量关系式中出现某些奇点(E. P. Wigner, 1948; A. И. Базь, 1957; G. Breit, 1957). 为了阐明这种现象的由来及性质，我们考虑一个简单情形，此时低于反应阈的只有弹性散射.

---

① 这个结果相当于 §144 末导出的 $p_f \to 0$ 时振幅 $f_{fi}$ 的常数极限. 截面式(144.4)正比于 $p_f$.

在阈值附近，所产生的 $A'$ 和 $B'$ 粒子处于轨道角动量 $l=0$ 的态中[对应于 (147.2)式]. 如果反应中的粒子无自旋，轨道角动量守恒，$A+B$ 粒子系统也处于 $s$ 态中. 按照(142.7)，$l=0$ 的反应分截面与弹性散射的 $S$ 矩阵元的关系为

$$\sigma_r^{(0)}=\frac{\pi}{k^2}(1-|S_0|^2), \tag{147.3}$$

式中 $k$ 是碰撞粒子的波数. 令(147.2)和(147.3)相等，我们求出正好在反应阈以上的精确到$\sqrt{E-E_{阈}}$数量级的模量$|S_0|$，它等于

$$|S_0|=1-\frac{k_{阈}^2}{2\pi}A\sqrt{E-E_{阈}},\quad (E>E_{阈}), \tag{147.4}$$

式中$k_{阈}=\sqrt{2mE_{阈}}/\hbar$, $m$ 是粒子 $A$ 和 $B$ 的折合质量，阈值以下只有弹性散射，故

$$|S_0|=1, (E<E_{阈}). \tag{147.5}$$

但是散射振幅从而 $S_0$ 应该是整个能量变化区域内的解析函数，这样的函数 [在阈值以上取值为 (147.4)，在阈值以下取值为(147.5)]，可同样精确地由下式表出

$$S_0=e^{2i\delta_0}\left[1-\frac{k_{阈}^2}{2\pi}A\sqrt{E-E_t}\right], \tag{147.6}$$

式中的 $\delta_0$ 是常数. $E<E_{阈}$ 时上式的根号变成虚数，方括号内表式的模量和 1 只差一个更高级的小量.

对于所有的 $l\neq0$, 不存在非弹性散射，所以

$$S_{阈}=e^{2i\delta_l},\quad (l\neq0). \tag{147.7}$$

在阈值附近，周相 $\delta_l$ 应取它在 $E=E_{阈}$ 处的值.①

把所得的 $S_{阈}$ 值代入(142.2)，即得反应阈附近散射振幅的以下表式:

---

① 由于$\delta_l(E)$在 $E>E_{阈}$ 和 $E<E_{阈}$ 时都是实函数，它可按 $E-E_{阈}$ 的整数幂展开成级数.

$$f(\theta, E)=f_{阈}(\theta)-\frac{k_t}{4\pi i}A\sqrt{E-E_{阈}}e^{2i\delta_0}, \qquad (147.8)$$

其中 $f_t(\theta)$ 是 $E=E_t$ 时的散射振幅．因此散射微分截面为

$$\begin{aligned}\frac{d\sigma}{do}&=|f_{阈}(\theta)|^2+\frac{k_{阈}}{2\pi}A\sqrt{E-E_{阈}}\,\mathrm{Im}\{f_{阈}(\theta)e^{-2i\delta_0}\}, E>E_{阈},\\ &=|f_{阈}(\theta)|^2-\frac{k_{阈}}{2\pi}A\sqrt{E-E_{阈}}\,\mathrm{Re}\{f_{阈}(\theta)e^{-2i\delta_0}\}, E<E_{阈},\end{aligned}$$

把振幅 $f_{阈}$ 写成 $|f_{阈}|e^{i\alpha(\theta)}$，最后可把结果写成下列形式

$$\frac{d\sigma}{do}=|f_{阈}(\theta)|^2-\frac{k_{阈}}{2\pi}A|f_{阈}(\theta)|\sqrt{|E-E_{阈}|}\times\begin{cases}\sin(2\delta_0-\alpha), E>E_{阈},\\ \cos(2\delta_0-\alpha), E<E_{阈},\end{cases} \qquad (147.9)$$

这个公式中截面和能量的关系，根据角度 $2\delta_0-\alpha$ 在第一，第二，第三和第四象限内而分别具有图 50$a, b, c, d$ 的形式．每种情形下都有两个分支位于公共的垂直切线的两边。

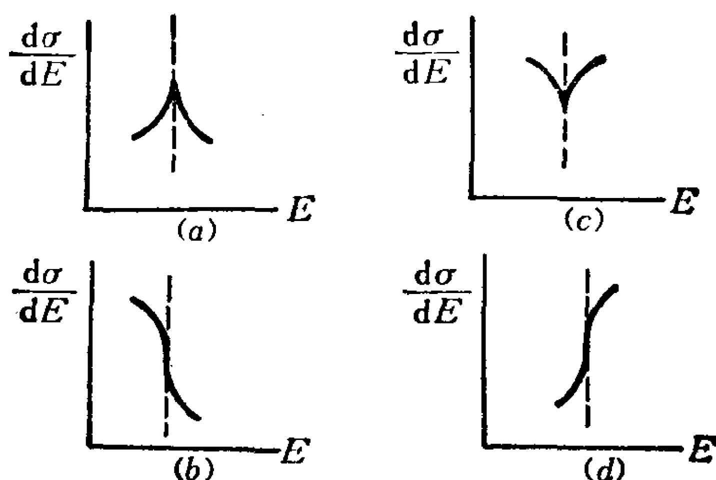



图 50

(147.9)对 $do$ 积分时，第二项的积分贡献只能来自$f_{阈}(\theta)$的各向同性部分，即弹性散射的 $s$ 分波振幅$(e^{2i\delta_0}-1)/2ik_{阈}$．从而得阈值附近的弹性散射总截面

$$\sigma=\sigma_{阈}-2A\sqrt{|E-E_{阈}|}\times\begin{cases}\sin^2\delta_0, & E>E_{阈},\\ \sin\delta_0\cos\delta_0, & E<E_{阈}.\end{cases} \qquad (147.10)$$

对于正的和负的$\sin\delta_0\cos\delta_0$,上式分别具有图 50 中 $(a)$ 或 $(b)$的形状.

由此可知，反应阈的存在使得弹性散射截面对能量的依赖关系中出现一个特征奇点.如果粒子具有自旋,公式当然会有定量方面的差别,但是这种效应的一般特性仍然不变①，如果阈值以下除了弹性散射外还有别的反应，那么在该反应的截面中也将出现相应的奇点. 这些截面都在 $E=E_{阈}$ 处具有一个奇点,并在 $E=E_{阈}$ 附近是$\sqrt{|E-E_{阈}|}$的线性函数，这个函数在阈值上下具有不同的斜率.

在辐射出一个正电荷粒子的核反应中，我们碰到了反应产物(粒子 $A'$ 和 $B'$)间具有库仑斥力的情形. 在这种情形下，当 $v'\to 0$ (即 $E\to E_{阈}$)时，反应截面以及这个截面对能量的所有微商都指数式地趋于零,并在其它过程的截面中没有奇点.

最后,我们来考虑生成两个电荷相异的慢粒子的反应,因而粒子间具有库仑引力. 这种反应的截面通过细致平衡原理与两个相吸慢粒子反应的截面式(143.6)相联系. 因此当 $v'\to 0$ 时，该截面趋向常数极限值:

$$v'\to 0,\quad \sigma_r=\text{常数}. \tag{147.11}$$

亦即通过阈值时反应截面突然具有某一有限值.

现在来阐明这种反应的弹性散射截面在阈值附近的奇点性质(А. И. Базь, 1959)、但它不可能像不带电粒子那样根据阈值以上的已知规律(147.11)用前面的简单办法直接地求得. 与后一种情况相比较,现在的情况由于下列事实而复杂化了: $A'+B'$ 系统在近阈区($E<E_{阈}$)具有束缚态，它们对应于库仑引力场中的分立能级,从能量角度看来,这些态可以在粒子 $A$ 和 $B$ 的碰撞中形成,但由于

① 自旋不等于零时，$s$ 态中的 $A'+B'$ 系统可以具有不等于零的总角动量,因而 $A+B$ 系统可以具有不同的轨道态.

弹性散射的可能性，它们只能是准定态，然而，它们的存在必然会在阈值以下的弹性散射中引起与布赖特-维格纳共振相类似的共振效应.

为了解决上述问题，我们来研究描述碰撞过程的波函数的结构. 与两道的存在相一致，相互作用粒子系统的薛定谔方程具有在整个位形空间内为有限的两个独立解，令 $\psi_1$ 和 $\psi_2$ 代表这两个任意选定和任意归一化的解. 我们可以把这两个函数线性组合起来用以描述其中一道为输入道情形时的散射，令 $a$ 和 $b$ 分别代表粒子对为 $A, B$ 和 $A', B'$ 的两个道，并令 $\psi=\alpha_1\psi_1+\alpha_2\psi_2$ 对应于输入道 $a$ 的情形，它描述粒子 $A$ 和 $B$ 的弹性散射以及反应 $A+B\to A'+B'$. 在反应阈附近，系数 $\alpha_1$ 和 $\alpha_2$ 显著地依赖于小动量 $k_b$，而任选的函数 $\psi_1$ 和 $\psi_2$ 在 $k_b=0$ 处没有奇点.

在远距离处，函数 $\psi$ 必须表为两项之和，它们对应于 $a$ 和 $b$ 道中粒子对的运动. 这两项都等于粒子的"内部"函数及其相对运动波函数的乘积①，后一种函数在 $a$ 道中呈 $R_a^- - S_{aa}R_a^+$ 形式，在 $b$ 道中呈 $-S_{ab}R_b^+$ 形式，其中 $R^+$ 和 $R^-$ 是相应道的出射和入射波，在远大于短程力的作用距离同时远小于 $1/k_b$ 的距离 $r_0$ 处，这些函数(及其导数)应该和"反应带"内的波函数 $\psi$ 算出的数值衔接起来. 衔接条件如下式所示

$$\alpha_1 a_1+\alpha_2 a_2=[R_a^- - S_{aa}R_a^+]_{r_0},\quad \alpha_1 b_1+\alpha_2 b_2=[-S_{ab}R_b^+]_{r_0}$$

$$\alpha_1 a_1'+\alpha_2 a_2'=[R_a^- - S_{aa}R_a^+]_{r_0}',\quad \alpha_1 b_1'+\alpha_2 b_2'=[-S_{ab}R_b^+]_{r_0}'$$

式中的 $a_1, a_1', b_1, b_1'\cdots$ 是从函数 $\psi_1$ 和 $\psi_2$ 算出的量. 按照上面的讨论，在近阈处它们可看作是一些和 $k_b$ 无关的常数. 把以上两对方程相除，我们得到具有两个未知数($\alpha_1/\alpha_2$ 和 $S_{aa}$)的两个线性方程.

---

① 规律(147.11)不但对总截面成立，而且对各种 $l$ 的分波截面也成立，参考§143末尾. 下面讨论的奇点因而也为所有的分波截面所具有. 它的性质完全可从下面给出的对 $l=0$ 情形的处理中明显看出. 为简洁计，相应的分波振幅中的指标 0 将省略掉.

这两个方程的系数中只包含一个“临界地”依赖于 $k_b$ 的量，即 $b$ 道中出射波的对数导数. 我们把这个量定义成

$$\lambda=\frac{1}{2\pi}\left[\frac{(rR_b^+)'}{rR_b^+}\right]_{r=r_0}.$$

我们没有必要求出这些方程的具体解答，只要注意到我们所需的量 $S_{aa}$(确定弹性散射振幅)是 $\lambda$ 的分式线性函数就足够了. 阈值以下的 $\lambda$ 是实数，因为波函数 $R_b^+$ 是实函数，它是无穷远处具有实条件(按 $e^{-\kappa_b r}$ 衰减，其中 $\kappa_b=\sqrt{2m_b(E_{阈}-E)}/\hbar$)的实薛定谔方程之解. 阈值以下一定有 $|S_{aa}|=1$，由此可见，这个分式线性函数 $S_{aa}(\lambda)$ 一定具有以下形式：

$$S_{aa}=\frac{1+\beta\lambda}{1+\beta^*\lambda}e^{2i\eta}, \tag{147.12}$$

式中 $\eta$ 是一个实常数，$\beta$ 是一个复常数.

现在来求作为动量 $k_b$ 的函数的 $\lambda$ 值. 由于粒子 $A$ 和 $B$ 之间作用着库仑引力，$rR_b^+$ 为无穷远处渐近地正比于 $e^{ik_b r}$ 的库仑波函数. 在库仑斥力场中，这个函数由 $G_0+iF_0$ 给出，$G_0$ 和 $F_0$ 见(138.4)和(138.7). 把式中的 $k$ 和 $r$ 同时变号，就变成了引力场情形①. 进行这种变换并算出对数导数(见§138)，我们有②

$$\lambda=\frac{i}{1-e^{-2\pi/k_b}}-\frac{1}{\pi}\left\{\ln k_b+\frac{1}{2}\left[\psi\left(\frac{i}{k_b}\right)-\psi\left(-\frac{i}{k_b}\right)\right]\right\}, \tag{147.13}$$

式中 $k_b$ 已假定为实量，所以这个式子是属于阈值以上的区域的. 当 $k_b\to0$ 时，(147.13)中的第一项趋于 $i$，第二项趋于零(见§138附注4)，因此阈值以上有

$$\lambda=i,\quad(E>E_{阈}). \tag{147.14}$$

---

① 下面采用库仑单位，$k$ 和 $r$ 的变号在形式上相当于库仑制长度单位的变号.

② 为了简化以后的公式，我们在大括号表达式中略去了与 $k_b$ 无关的实常数 $-\ln 2r_0-2C$；这相当于不太重要地重新定义(147.12)式中的复量 $\beta$ 和实量 $\eta$.

把 $k$ 改成 $i\kappa$ 后，就过渡到阈值以下的区域，当 $\kappa\to 0$ 时由(147.13)式得①

$$\lambda=-\cot(\pi/\kappa_b) \qquad (E<E_{阈}) \tag{147.15}$$

这些公式解决了所考虑的问题. 弹性散射截面为

$$\sigma_e=\pi k_a^{-2}|S_{aa}-1|^2.$$

阈值以上有：

$$S_{aa}=\frac{1+i\beta}{1+i\beta^*}e^{2i\eta}, \quad (E>E_{阈}). \tag{147.16}$$

和反应截面一样，散射截面在这个区域内是常数. 条件 $|S_{aa}|<1$ 意味着 $\mathrm{Im}\beta>0$.

阈值以下有

$$S_{aa}=e^{2i\eta}\frac{\beta-\tan(\pi/\kappa_b)}{\beta^*-\tan(\pi/\kappa_b)}. \tag{147.17}$$

这个表式具有无穷多个共振，其密度向着 $E=E_{阈}$ 点增长，这些共振能量等于下式的根：

$$S_{aa}=-1, \text{即} \ \mathrm{Re}e^{i\eta}(\beta-\tan(\pi/\kappa_b)]=0;$$

由于短程力的存在，这些能级相对于纯库仑能级(它们)是 $\tan(\pi/\kappa_b)=0$ 的根)而言略有移动. 当能量 $E$ 趋近于阈值时，弹性散射截面在零和 $4\pi/k_a^2$ 之间振荡，如图 51 所示. 出现共振结构的整个阈下区的宽度，由第一库仑能级的能值所确定②.

---

① (147.13)中的第一项给出 $-\frac{1}{2}\cot(\pi/\kappa_b)+\frac{1}{2}i$，(147.13)的大括号内的部分趋于 $\frac{1}{2}\pi\cot(\pi/\kappa_b)+\frac{1}{2}i\pi$，其中应用了公式 $\psi(x)-\psi(-x)=-\pi\cot\pi x-1/x$.（它可从熟知公式 $\Gamma(x)\Gamma(-x)=-\pi/x\sin\pi x$ 的对数导数求出)和 $x\to\infty$ 时的极限表式

$$\psi(x)\approx\ln x-1/2x.$$

② 近阈反应的另一个有趣情形是原子被一个电子所电离，该电子的能量只是略大于该原子的第一个电离能. 这些条件下的碰撞过程可以看作是准经典的，但由于末态中存在着三个带电粒子而使问题极大地复杂化了. 这个难题的普遍解由 G. H. Wannier(Physical Review **90**, 817, 1953)给出. 我们发现，一个中性原子的电离几率正比于 $(E-I)^{\alpha}$，其中 $\alpha=\frac{1}{4}\sqrt{91/3-1}=1.13$，$E-I$ 是电子的超过电离阈值的能量.

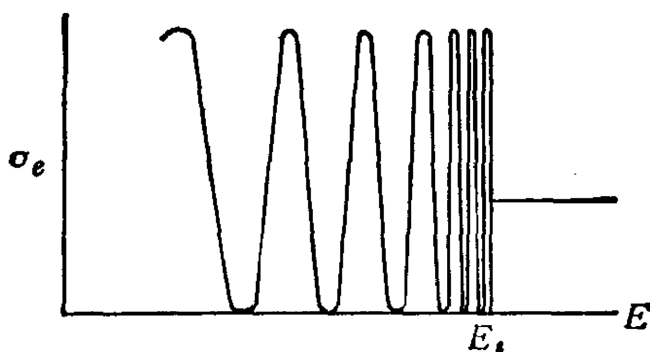



图 51

## § 148 快电子和原子的非弹性碰撞

快电子和原子间的非弹性碰撞，可用 § 139 中对弹性碰撞的同样方式，用玻恩近似加以研究①. 玻恩近似的适用条件仍和以前一样，入射电子的速度必须远大于原子中电子的速度，碰撞中的能量损失可以是任意值，如果电子失去了它的相当大一部分能量，原子被电离，这些能量被转移到其中的一个电子身上. 可是，我们总可以把碰撞后具有较大速度的那个电子看作散射电子，这样，如果入射电子速度很大，则散射电子的速度也很大.

正如早已指出的，在一个电子和一个原子的碰撞中，质心静止的坐标系可以认为与原子静止的坐标系一致，而后一坐标系正是下面实际上要采用的.

非弹性碰撞伴有原子的内态变化. 该原子可能从基态跳到某一个分立谱或连续谱的激发态，后一种情形意味着原子的电离. 推导一般公式时，我们可以把这两种情形合在一起考虑.

我们先从连续谱状态之间跃迁几率的一般公式出发(和 § 126 中一样)，把它应用到具有入射电子和原子的系统. 令 $\mathbf{p}, \mathbf{p}'$ 为入射电子在碰撞前后的动量，$E_0, E_n$ 为原子的相应能量，至于跃迁几率，(126.9)式换成

① § 148— § 150 中大部分结果是由 H. A. Bethe(1930)得到的.

$$dw_n=\frac{2\pi}{\hbar}|\langle n,\mathbf{p}'|U|0,\mathbf{p}\rangle|^2\delta\left(\frac{p'^2-p^2}{2m}+E_n-E_0\right)\frac{d^3p'}{(2\pi\hbar)^3},$$

(148.1)

式中的矩阵元是入射电子和原子间以下相互作用能的矩阵元:

$$U=\frac{Ze^2}{r}-\sum_{a=1}^{Z}\frac{e^2}{|\mathbf{r}-\mathbf{r}_a|},$$

式中 $\mathbf{r}$ 是入射电子的径矢,$\mathbf{r}_a$ 是原子中电子的径矢,原点位于原子核处,$m$ 是电子质量.

电子波函数 $\psi_{\mathbf{p}},\psi_{\mathbf{p}'}$ 由以前的(126.10)(126.11)式确定,此时 $dw$ 就是碰撞截面 $d\sigma$. 我们把初态和末态原子波函数记作 $\psi_0$ 和 $\psi_n$. 如果原子的末态属于分立谱,则 $\psi_n$(和 $\psi_0$ 一样)按通常方式归一化.反之,如果原子进入连续谱的一个态,波函数应按确定该态的参量 $\nu$ 的 $\delta$ 函数归一化(例如,这些参量可以是原子的能量,以及电离时离开原子的那个电子的动量的各分量),由此求出的截面给出了原子碰撞到参量值介于 $\nu$ 和 $\nu+d\nu$ 区间内的连续谱态时的几率.

(148.1)对绝对值 $p'$ 积分后得

$$d\sigma_n=\frac{mp'}{4\pi^2\hbar^4}|\langle n\mathbf{p}'|U|0\mathbf{p}\rangle|^2do',$$

式中的 $p'$ 由能量守恒律确定:

$$\frac{1}{2m}(p^2-p'^2)=E_n-E_0. \tag{148.2}$$

把(126.10)、(126.11)式的电子波函数代入矩阵元中,得

$$d\sigma_n=\frac{m^2}{4\pi^2\hbar^4}\frac{p'}{p}\left|\iint Ue^{-i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}}\psi_n^*\psi_0d\tau dV\right|^2do, \tag{148.3}$$①

---

① 这个公式是微扰论的一般结果,不但适用于电子和原子的碰撞,也适用于两个粒子的任何非弹性碰撞,确定了质心为静止的坐标系中的散射截面($m$ 是这两个粒子的折合质量).

式中 $d\tau=dV_1dV_2\cdots dV_Z$ 是原子中 $Z$ 个电子的位形空间 的体积元，我们略去了 $do$ 上的撇号. 当 $n=0$ 和 $p=p'$ 时，(148.3)变成弹性散射截面公式.

由于函数 $\psi_n$ 与 $\psi_0$ 正交，$U$ 中的原子核作用项 $Ze^2/r$ 对 $\tau$ 积分后等于零，因此对非弹性碰撞有

$$d\sigma_n=\frac{m^2}{4\pi^2\hbar^4}\ \frac{p'}{p}\sum_a\left|\iint\frac{e^2}{|\mathbf{r}-\mathbf{r}_a|}e^{-i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}}\psi_n^*\psi_0 d\tau dV\right|^2 do. \tag{148.4}$$

对 $V$ 的积分可按 §139 进行. 而积分

$$\varphi_{\mathbf{q}}(\mathbf{r}_a)=\int e^{-i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}}dV/|\mathbf{r}-\mathbf{r}_a|$$

在形式上等同于密度分布为 $\rho=\delta(\mathbf{r}-\mathbf{r}_a)$ 的空间电荷在 $\mathbf{r}$ 点处的势的傅里叶分量，因此(139.1)式给出

$$\varphi_{\mathbf{q}}(\mathbf{r}_a)=\frac{4\pi}{q^2}e^{-i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}_a}\ . \tag{148.5}$$

将此式代入(148.4)，最后得到以下非弹性碰撞截面的一般表式:

$$d\sigma_n=\left(\frac{e^2m}{\hbar^2}\right)^2\frac{4k'}{kq^4}\left|\langle n|\sum_a e^{-i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}_a}|0\rangle\right|^2 do, \tag{148.6}$$

式中的矩阵元是对原子波函数而言的，我们引进了波矢量 $\mathbf{k}'=\mathbf{p}'/\hbar$, $\mathbf{k}=\mathbf{p}/\hbar$ 代替了动量. 这个公式给出了电子被散射到立体角元 $do$ 内而原子跃迁到第 $n$ 个激发态时的碰撞几率. 矢量 $-\hbar\mathbf{q}$ 是电子在碰撞中给予原子的动量.

为计算方便计，最好把截面中的立体角元改成矢量 $\mathbf{q}$ 的绝对值的元 $dq$. 矢量 $\mathbf{q}$ 是由 $\mathbf{q}=\mathbf{k}'-\mathbf{k}$ 定义的，其绝对值为

$$q^2=k^2+k'^2-2kk'\cos\vartheta. \tag{148.7}$$

因此，给定了 $k,k'$，亦即给定了电子的能量损失后，有

$$qdq=kk'\sin\vartheta d\vartheta=\frac{kk'}{2\pi}do, \tag{148.8}$$

从而(148.6)式可写成

$$d\sigma_n = 8\pi\left(\frac{e^2}{\hbar v}\right)^2 \frac{dq}{q^3}\left|\langle n|\sum_a e^{-i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}_a}|0\rangle\right|^2. \tag{148.9}$$

矢量 $\mathbf{q}$ 在以下的计算中起着重要的作用. 让我们较详细地考察一下它和散射角 $\vartheta$ 以及碰撞中的能量转移 $E_n-E_0$ 的关系，下面将看到，最重要的碰撞是散射角很小($\vartheta\ll1$)、能量转移远小于入射电子能量 $E=\frac{1}{2}mv^2$ 的碰撞：$E_n-E_0\ll E$. 这种情形下 $k-k'$ 的值也很小($k-k'\ll k$)，而且

$$E_n-E_0=\hbar^2(k^2-k'^2)/2m\approx\hbar^2k(k-k')/m=\hbar v(k-k').$$

由于 $\vartheta$ 很小，从(148.7)式得

$$q^2\approx(k-k')^2+(k\vartheta)^2,$$

最后有

$$q=\sqrt{[(E_n-E_0)/\hbar v]^2+(k\vartheta)^2}. \tag{148.10}$$

$q$ 的极小值为

$$q_{\min}=(E_n-E_0)/\hbar v. \tag{148.11}$$

在小角度范围内，我们还可以进一步划分成不同的区域，这取决于小量 $\vartheta$ 和 $v_0/v$ 之间的关系，此处 $v_0$ 具有原子中电子速度的数量级. 如果我们考虑的能量转移具有原子中电子能量 $\epsilon_0$ 的数量级($E_n-E_0\sim\epsilon_0\sim mv_0^2$)，则当 $(v_0/v)^2\ll\vartheta\ll1$ 时有

$$q=k\vartheta=(mv/\hbar)\vartheta; \tag{148.12}$$

(148.10)式根号中的第一项与第二项相比可以略去. 在这个角度范围内，$q$ 因而和能量转移无关. 当 $\vartheta\ll1$ 时，$q$ 既可以大于也可以小于 $1/a_0$($a_0$ 具有原子线度的数量级). 在对能量转移作出同样的假定下，我们有

$$\vartheta\sim v_0/v \text{ 时}, qa_0\sim1. \tag{148.13}$$

现在把一般公式(148.9)应用于小的 $q$($qa_0\ll1$，即 $\vartheta\ll v_0/v$).

这种情形下可把指数因子展成 $\mathbf{q}$ 的幂级数：

$$e^{-i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}_a}\approx 1-i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}_a=1-iqx_a,$$

我们选择了 $x$ 轴沿矢量 $\mathbf{q}$ 的坐标系. 上式代入(148.9)时，由于波函数 $\psi_0$ 和 $\psi_n$ 的正交性，含 1 之项等于零，我们就得

$$d\sigma_n=8\pi\left(\frac{e}{\hbar v}\right)^2\frac{dq}{q}|\langle n|d_x|0\rangle|^2=\left(\frac{2e}{\hbar v}\right)^2|\langle n|d_x|0\rangle|^2\frac{do}{\vartheta^2},\tag{148.14}$$

式中 $d_x=e\sum\limits_a x_a$ 是原子的偶极矩分量，我们看到，截面（对小的 $q$）是由与原子的状态变化相对应的那个偶极矩跃迁矩阵元的模量平方给出的.①

但有可能出现这样的情况，由于选择定则，对所考虑的跃迁讲来偶极矩矩阵元都等于零（**禁戒跃迁**），这时 $e^{-i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}_a}$ 还需展至下一项，我们得

$$d\sigma_n=2\pi\left(\frac{e^2}{\hbar v}\right)^2\left|\langle n\left|\left(\sum_a x_a^2\right)\right|0\rangle\right|^2 qdq.\tag{148.15}$$

现在来考虑 $q$ 很大（$qa_0\gg1$）的相反极端情形. 如果 $q$ 很大，这意味着原子接受的动量远大于原子中电子原有的内禀动量. 从物理上考虑这是很明显的：在这种情形下，我们可以把原子中电子看作是自由的，而和原子的碰撞可以看作是入射电子与原子中原为静止的电子的弹性碰撞. 这一点也可从普遍公式 (148.9) 看出来，当 $q$ 很大时，矩阵元中的被积式含有急剧振荡因子 $e^{-i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}_a}$，如果 $\psi_n$ 中不含类似的因子，这个积分差不多等于零. 这样的 $\psi_n$ 函数对应于一个电离原子，辐射出一个动量为 $-\hbar\mathbf{q}=\mathbf{p}-\mathbf{p}'$ 的电子，这

---

① 物理上通常感兴趣的截面 $d\sigma_n$，是对末态原子角动量的所有空间取向求和并对初态角动量的所有空间取向求平均以后的截面. 经过这样的求和及求平均以后，

$$|\langle n|d_x|0\rangle|^2$$

和 $x$ 轴的方向无关.

个动量相当于两个自由电子碰撞时由动量守恒律所给出的动量.

具有大动量转移的碰撞中，入射电子和原子电子有可能获得差不多大小的末速度. 与相碰粒子的全同性有关的交换作用开始变得重要起来，尽管普遍公式(148.9)中并没有计及这一点. 有交换的快电子散射截面由(137.9)式给出，这个公式采用的是碰撞前一个电子为静止的坐标系. 对快电子讲来，(137.9)式最后一项中的余弦函数可以取作 1. 乘以原子中的电子数 $Z$ 以后，即得一个电子和一个原子碰撞的以下截面式:

$$d\sigma=4Z\left(\frac{e^2}{mv^2}\right)^2\left[\frac{1}{\sin^4\vartheta}+\frac{1}{\cos^4\vartheta}-\frac{1}{\sin^2\vartheta\cos^2\vartheta}\right]\cos\vartheta do, \tag{148.16}$$

为方便计，此式中的散射角最好用碰撞后电子具有的能量来表达. 我们知道，能量为 $E=\frac{1}{2}mv^2$ 的粒子和同质量的静止粒子相碰后，所得的粒子能量分别为

$$\epsilon=E\sin^2\vartheta,\quad E-\epsilon=E\cos^2\vartheta.$$

为了求出有关 $d\epsilon$ 区间的截面，我们按关系式

$$\sin\vartheta do=2\pi\sin\vartheta\cos\vartheta d\vartheta=(\pi/E)d\epsilon,$$

把 $do$ 化成 $d\epsilon$. 代入(148.16)即得最后表式

$$d\sigma_\epsilon=\pi Ze^4\left[\frac{1}{\epsilon^2}+\frac{1}{(E-\epsilon)^2}-\frac{1}{\epsilon(E-\epsilon)}\right]\frac{d\epsilon}{E}. \tag{148.17}$$

如果能量 $\epsilon$ 和 $E-\epsilon$ 中有一个远小于另一个，上式三项中只有一项(第一或第二项)是重要的. 这是可以预料的，因为当两个电子的能量相差很大时，交换作用不再重要，它应回到熟知的卢瑟福公式①.

---

① 对于正电子和原子的碰撞不存在交换效应，卢瑟福公式

$$d\sigma_\epsilon=\frac{\pi Ze^4}{E}\frac{d\epsilon}{\epsilon^2}$$

对所有的 $g\gg1/a_0$ 成立.

微分截面对所有角度积分(或对 $q$ 积分)后给出把原子激发到给定态的总截面 $\sigma_n$. $\sigma_n$ 与入射电子速度的关系,是和偶极矩的相应跃迁矩阵元是否存在具有密切的关系. 我们先假定这个矩阵元不等于零. 于是当 $q$ 小时, $d\sigma_n$ 由(148.14)式给出, 而且我们看到, 当 $q$ 减小时对 $q$ 的积分是对数发散的. 另一方面, 在大 $q$ 的区域内,当 $q$ 增大时截面(对一给定的能量转移 $E_n-E_0$) 指数式地减小,这是因为(148.9) 矩阵元的被积函数中存在着一个(早已指出的)剧烈振荡因子. 由此可见,对 $q$ 积分时 $q$ 值小的区域起着主要作用, 我们可把积分范围限制在从(148.11)式的极小值开始到数量级为 $1/a_0$ 的某个值为止.

结果得

$$\sigma_n=8\pi\left(\frac{e}{\hbar v}\right)^2 \ |\langle n|d_x|0\rangle|^2\ln\left(\beta_n\frac{v\hbar}{e^2}\right), \tag{148.18}$$

其中 $\beta_n$ 是一个无量纲常数,我们不可能算出它的一般形式①.

另一方面,如果偶极矩矩阵元对于所考虑的跃迁讲来等于零,那么对 $q$ 的积分无论对小的 $q$(可从(148.15)式看出)以及对大的 $q$ 都是很快地收敛的. 积分的最重要区域为 $q\sim1/a_0$. 这时不可能得到普遍的定量公式, 我们只能推出这样的结论: $\sigma_n$ 将和速度的平方成反比:

$$\sigma_n=\text{常数}/v^2. \tag{148.19}$$

这可从普遍公式(148.9)直接看到,按该式当 $q\sim1/a_0$ 时 $d\sigma_n$ 将和 $1/v^2$ 成正比.

我们来求散射到某一给定立体角元而不管原子进入哪个态的非弹性散射截面 $d\sigma_r$, 为此,需要把(148.9) 式对所有 $n\neq0$ 的态求

---

① 我们假定了 $E_n-E_0$ 具有原子中电子能量 $\epsilon_0$ 的数量级. 对于更大的能量转移($E_n-E_0\sim E\gg\epsilon_0$), (148.14)和(148.18)仍不能适用, 因为此时的偶极矩矩阵元变得很小,不能只取 $q$ 的幂级数展式的第一项.

和，也就是对基态以外的所有原子态（包括分立谱和连续谱）求和．我们不去考虑大角度区间和小角度区间，而假定 $1\gg\vartheta\gg(v_0/v)^2$，于是按(148.12)，$q$ 和能量转移值无关①．

后一种情况使我们很易算出非弹性碰撞的总截面，亦即求和式

$$d\sigma_r=\sum_{n\neq 0}d\sigma_n=8\pi\left(\frac{e^2}{\hbar v}\right)^2\sum_{n\neq 0}|\langle n|\sum_a e^{-i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}_a}\ |0\rangle|^2\frac{dq}{q^3}$$

$$=\left(\frac{2e^2}{mv^2}\right)^2\sum_{n\neq 0}|\langle n|\sum_a e^{-i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}_a}\ |0\rangle|^2\frac{do}{\vartheta^4}. \qquad (148.20)$$

为此我们注意到，根据矩阵乘法规则，对任意一个量 $f$ 有

$$\sum_n|f_{0n}|^2=\sum_n f_{0n}f_{0n}^*=\sum_n f_{0n}(f^+)_{n0}=(ff^+)_{00}$$

上式是对所有的 $n$ 求和，包括 $n=0$．因而

$$\sum_{n\neq 0}|f_{0n}|^2=\sum_n|f_{0n}|^2-|f_{00}|^2=(ff^+)_{00}-|f_{00}|^2. \qquad (148.21)$$

把此式应用于 $f=\Sigma e^{-i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}_a}$，我们有

$$d\sigma_r=\left(\frac{2e^2}{mv^2}\right)^2\left\{\left\langle\left|\sum_a e^{-i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}_a}\ \right|^2\right\rangle-\left|\left\langle\sum_a e^{-i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}_a}\ \right\rangle\right|^2\right\}\frac{do}{\vartheta^4},$$

$$(148.22)$$

式中〈…〉代表对原子基态求平均（取 00 对角矩阵元）．根据定义，平均值〈$\Sigma e^{-i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}_a}$〉就是基态原子的原子形状因子 $F(q)$．大括号内的第一项可写成

①(148.9)式的求和也对 $E_n-E_0\gg\epsilon_0$ 的态进行，此时(148.12)式不再成立．但对具有大能量转移的跃迁讲来，有效截面比较小，这些项在求和式中并不重要．所加的条件 $\vartheta\ll 1$ 使我们可以不必考虑交换效应．

$$\left|\sum_{a=1}^{Z} e^{-i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}_a}\right|^2 = Z + \sum_{a\neq b} e^{i\mathbf{q}\cdot(\mathbf{r}_a-\mathbf{r}_b)},$$

从而得一般公式

$$d\sigma_r = \left(\frac{2e^2}{mv^2}\right)^2 \left\{Z - F^2(q) + \left\langle \sum_{a\neq b} e^{i\mathbf{q}\cdot(\mathbf{r}_a-\mathbf{r}_b)} \right\rangle\right\} \frac{do}{\vartheta^4}. \qquad (148.23)$$

当 $q$ 很小可按 $q$ 的幂展开($v_0/v \ll qa_0 \ll 1$, 相当于角度 $(v_0/v)^2 \ll \vartheta \ll v_0/v$)时, 此式可大为化简. 为方便计,我们不去展开(148.23)式, 而把(148.14)式的 $d\sigma_n$ 重新对 $n$ 求和. 利用 $f = d_x$ 的(148.21)式并记得 $\langle d_x \rangle = 0$, 求和后得

$$d\sigma_r = \left(\frac{2e}{\hbar v}\right)^2 \langle d_x^2 \rangle \frac{do}{\vartheta^2}. \qquad (148.24)$$

把上式和小角度弹性散射截面式(139.5) 比较一下是有意义的, 后者和 $\vartheta$ 无关, 散射到 $do$ 立体角元内的非弹性截面则随 $\vartheta$ 的减小而按 $1/\vartheta^2$ 的规律增长.

对于 $1 \gg \vartheta \gg v_0/v$ (因而 $qa_0 \gg 1$)范围内的 $\vartheta$ 角, (148.23)大括号内的第二和第三项都很小, 我们简单地有

$$d\sigma_r = Z\left(\frac{2e^2}{mv^2}\right)^2 \frac{do}{\vartheta^4}, \qquad (148.25)$$

也就是对 $Z$ 个原子电子的卢瑟福散射(没有交换作用), 我们记得, 对于弹性散射有(139.6)式, 它不是和 $Z$ 而是和 $Z^2$ 成正比.

最后, 对角度积分后, 我们得到对所有的角度以及对原子的任意激发而言的非弹性散射总截面 $\sigma_r$. 和计算(148.18)式的 $\sigma_n$ 完全一样, 可得

$$\sigma_r = 8\pi\left(\frac{e}{\hbar v}\right)^2 \langle d_x^2 \rangle \ln\left(\beta \frac{v\hbar}{e^2}\right). \qquad (148.26)$$

## 例 题①

1. 求快电子被氢原子(处于基态)非弹性散射的角分布($1\gg\vartheta\gg v^{-2}$).

**解** 对氢原子而言,(148.23)大括号内的第三项等于零,而原子形状因子$F(q)$已在§139例题中算出.把它代入得

$$d\sigma_r=\frac{4}{v^4\vartheta^4}\left[1-\frac{1}{\left(1+\frac{v^2\vartheta^2}{4}\right)^4}\right]do.$$

2. 基态氢原子受电子碰撞而激发到第$n$个分立谱能级($n$是主量子数),求微分截面.

**解** 最好用抛物坐标计算矩阵元. 取$z$轴沿矢量$\mathbf{q}$的方向,此时有$e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}}=e^{iqz}=e^{iq(\xi-\eta)/2}$. 基态波函数呈 $\psi_{000}=\pi^{-1/2}e^{-(\xi+\eta)/2}$ 形式. 仅当跃迁到$m=0$的态时矩阵元才不等于零. 这种态的波函数为

$$\psi_{n_1n_20}=\frac{1}{\sqrt{\pi n^2}}e^{-\frac{\xi+\eta}{2n}}F\left(-n_1,1,\frac{\xi}{n}\right)F\left(-n_2 1,\frac{\eta}{n}\right)$$

$(n=n_1+n_2+1)$. 所求的矩阵元由以下积分式给出:

$$\langle n_1n_20|e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}}|000\rangle=\iint_0^\infty e^{i\frac{q}{2}(\xi-\eta)}\psi_{000}\psi_{n_1n_20}\frac{(\xi+\eta)}{4}\,2\pi d\xi d\eta,$$

这个积分可用数学附录§$f$中所引的公式加以计算. 结果得:

$$|\langle n_1n_20|e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}}|000\rangle|^2=2^8n^6q^2\frac{[(n-1)^2+(qn)^2]^{n-3}}{[(n+1)^2+(qn)^2]^{n+3}}[(n_1-n_2)^2+(qn)^2],$$

$n_1+n_2=n-1$值相同的态都有相同的能量. 在$n$为给定的情形下,对所有可能的$n_1-n_2$值求和,并把结果代入(148.9),即得所求的截面:

$$d\sigma_n=\frac{2^{11}\pi}{v^2}n^7\left[\frac{n^2-1}{3}+(qn)^2\right]\frac{[(n-1)^2+(qn)^2]^{n-3}}{[(n+1)^2+(qn)^2]^{n+3}}\frac{dq}{q}.$$

3. 试求氢原子第一激发态被激发的总截面.

**解** 公式

① 所有题都采用原子单位.

$$d\sigma_2=\frac{2^8\pi}{v^2}\frac{dq}{q\left(q^2+\frac{9}{4}\right)^5}$$

尚需对从 $q_{min}=(E_2-E_1)/v=3/8v$ 到 $q_{max}=2v$ 的所有 $q$ 值积分，只保留 $v$ 的最高次项．经过初等积分后结果得①

$$\sigma_2=\frac{2^{18}\pi}{3^{10}v^2}\left(\ln 4v-\frac{25}{24}\right)=\frac{4\pi}{v^2}0.555\ln\frac{v^2}{0.50}.$$

4．求氢原子（处于基态）电离而次级电子发射到给定方向的有效截面；次级电子的能量远小于初级电子的能量，故交换作用可以略去（H. S. W. Massey, C. B. O. Mohr, 1933）．

**解** 初态的原子波函数为 $\psi_0=\pi^{-1/2}e^{-r}$．末态的原子已电离，从中发射出的电子具有波矢量 $\boldsymbol{\kappa}$（和能量 $\varepsilon=\frac{1}{2}\kappa^2$）．这个态由(136.9)的函数 $\psi_{\kappa}^{(-)}$ 描写，其中的出射部分（在无穷远处）只有沿 $\boldsymbol{\kappa}$ 方向传播的一个平面波，$\psi_{\kappa}^{(-)}$ 函数已按 $\boldsymbol{\kappa}/2\pi$ 空间的 $\delta$ 函数归一化，因此由它算出的截面是对 $d^3\kappa/(2\pi)^3$ 亦即 $\kappa^2 d\kappa do_\kappa/(2\pi)^3$ 而言的，$do_\kappa$ 是沿次级电子方向的立体角元．于是有

$$d\sigma=\frac{4k'\kappa^2}{(2\pi)^3kq^4}|\langle\boldsymbol{\kappa}|e^{-i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}}|0\rangle|^2 do\,do_\kappa d\kappa$$

（$do$ 是对散射电子而言的立体角元），其中的

$$\langle\boldsymbol{\kappa}|e^{-i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}}|0\rangle=\int\psi_{\kappa}^{(-)*}e^{-i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}}\psi_0 dV=\frac{e^{-\pi/2\kappa}\,\Gamma\left(1-\frac{i}{\kappa}\right)}{\pi^{1/2}}I,$$

$$I=\left\{-\frac{\partial}{\partial\lambda}\int e^{-i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}-i\boldsymbol{\kappa}\cdot\mathbf{r}-\lambda r}F\left(\frac{i}{\kappa},\ 1V,\ i(\kappa r+\boldsymbol{\kappa}\cdot\mathbf{r})\right)\frac{dV}{r}\right\}_{\lambda=1}.$$

---

① 对任意的$v$也能算出截面．用数值计算法还可以算出被氢原子非弹性散射的总截面：

$$\sigma_r=4\pi\ln\frac{v^2}{0.160},$$

式中包括了以下两项贡献，即来自原子分立谱状态被激发的碰撞以及原子被电离的碰撞：

$$\sigma_{激发}=\frac{4\pi}{v^2}\times 0.715\ln\left(\frac{v^2}{0.160}\right),$$

$$\sigma_{i0}=\frac{4\pi}{v^2}\times 0.285\ln\left(\frac{v^2}{0.012}\right).$$

积分时采用抛物坐标，$z$ 轴沿 $\boldsymbol{\kappa}$ 方向，$\varphi$角从$(\mathbf{q},\boldsymbol{\kappa})$平面算起：

$$I=\left\{-\frac{1}{2}\frac{\partial}{\partial\lambda}\int_0^\infty\int_0^\infty\int_0^{2\pi}\exp\left[-\frac{i}{2}q(\xi-\eta)\cos\gamma+iq\sqrt{\xi\eta}\sin\gamma\cos\varphi\right.\right.$$
$$\left.\left.-\frac{\lambda}{2}(\xi+\eta)-\frac{i}{2}\kappa(\xi-\eta)\right]F\left(-\frac{i}{\kappa},1,-i\kappa\xi\right)d\varphi d\xi d\eta\right\}_{\lambda=1},$$

式中 $\gamma$ 是 $\boldsymbol{\kappa}$ 和 $\mathbf{q}$ 的夹角. 作替代$\sqrt{\eta}\cos\varphi=u$, $\sqrt{\eta}\sin\varphi=v$ 后，很易对 $\varphi$ 和 $\eta$ 积分，积出后得

$$\frac{I}{2\pi}=\left\{\frac{\partial}{\partial\lambda}\int_0^\infty\exp\left\{\frac{-q^2\sin^2\gamma+\lambda^2+(\kappa+q\cos\gamma)^2}{2[i(\kappa+q\cos\gamma)-\lambda]}\xi\right\}\right.$$
$$\left.\times\frac{F\left(-\frac{i}{\kappa},1,-i\kappa\xi\right)d\xi}{[i(\kappa+q\cos\gamma)-\lambda]}\right\}_{\lambda=1},$$

此处的积分可从 $\gamma=1, n=0$ 的$(f\cdot3)$式求出. 进一步的计算虽然冗长但是是初等的，结果得到以下的截面表式：

$$d\sigma=\frac{2^8k'\kappa[q^2+2q\kappa\cos\gamma+(\kappa^2+1)\cos^2\gamma]}{\pi kq^2[q^2+2q\kappa\cos\gamma+1+\kappa^2]^4[(q+\kappa)^2+1][(q-\kappa)^2+1](1-e^{-2\pi/\kappa})}$$
$$\times\exp\left(-\frac{2}{\kappa}\arctan\frac{2\kappa}{q^2-\kappa^2+1}\right)do\,do_\kappa\,d\kappa.$$

对次级电子的所有发射角求积分时可用初等方法进行，结果得到辐射电子能量给定为$\frac{1}{2}\kappa^2$ 情形下散射的角分布：

$$d\sigma=\frac{2^{10}k'\kappa}{kq^2}\frac{\left[q^2+\frac{1}{3}(1+\kappa^2)\right]\exp\left(-\frac{2}{\kappa}\arctan\frac{2\kappa}{q^2-\kappa^2+1}\right)}{[(q+\kappa)^2+1]^3[(q-\kappa)^2+1]^3(1-e^{-2\pi/\kappa})}do\,d\kappa.$$

$q\gg1$ 时上式在 $\kappa\approx q$ 处具有很陡的极大值；在这个极大值附近有

$$d\sigma=\frac{2^5}{3\pi\kappa^4}\frac{d\kappa\,do}{[1+(q-\kappa)^2]^3}.$$

对 $do=2\pi q dq/k^2\cong(2\pi\kappa/k^2)d(q-\kappa)$积分后，得到表式 $8\pi d\kappa/k^2\kappa^3$，正如我们所预期的那样，它和(148.17)式中的第一项一致。

## §149 有效滞阻

碰撞论的应用中，计算碰撞粒子的平均能量损失极为重要. 我们最好用以下的量标志这种能量损失：

$$d\kappa=\sum_n (E_n-E_0)d\sigma_n, \tag{149.1}$$

我们将把这个量称为(微分) **有效滞阻** (эффективный торможение), 式中的求和当然既包括分立谱也包括连续谱, $d\kappa$ 是对散射到某一给定立体角元内的情形而言的①.

快电子有效滞阻的一般公式为:

$$d\kappa=8\pi\left(\frac{e^2}{\hbar v}\right)^2\sum_n (E_n-E_0)\left|\left\langle n\left|\sum_a e^{-i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}_a}\right|0\right\rangle\right|^2\frac{dq}{q^3}, \tag{149.2}$$

其中的 $d\sigma_n$ 取自(148.9)式. 正如推导(148.23)式那样, 我们排除了对极小角度区域的考虑, 并假定 $1\gg\vartheta\gg(v_0/v)^2$. 于是 $\mathbf{q}$ 和能量转移值无关, 我们就可以算出对 $n$ 求和的一般形式.

这个算法要用到下面导出的**求和定理**. 作为坐标函数的某个量 $f$, 它的矩阵元及其对时间导数 $\dot{f}$ 的矩阵元由下式联系:

$$(\dot{f})_{0n}=-\frac{i}{\hbar}(E_n-E_0)f_{0n}, \tag{149.3}$$

所以有

$$\begin{aligned}\sum_n (E_n-E_0)\,|f_{0n}|^2&=\sum_n (E_n-E_0)f_{0n}(f_{0n})^*\\&=\sum_n (E_n-E_0)f_{0n}(f^+)_{n0}\\&=i\hbar\sum_n (\dot{f})_{0n}(f^+)_{n0}=i\hbar(\dot{f}f^+)_{00},\end{aligned}$$

原子的定态波函数可以选成实函数. 此时坐标函数 $f$ 的矩阵元就具有关系式 $f_{0n}=f_{n0}$, 而对(149.3) 式的矩阵元讲来就有相应的关系式 $(\dot{f})_{0n}=-(\dot{f})_{n0}$. 因此以上的求和式还可写成以下形式:

---

① 如果一个电子通过气体, 它在各个原子上的散射是彼此独立地进行的, 那末 $Nd\kappa$ ($N$是单位体积内的气体原子数)就是电子在偏转到给定的立体角元的碰撞中单位路程内所损失的能量.

$$\sum_n (E_n - E_0)|f_{0n}|^2 = -i\hbar \sum_n (f^+)_{0n}(\dot{f})_{n0} = -i\hbar(f^+\dot{f})_{00}.$$

以上两式相加后除以 2，即得求和定理:

$$\sum_n (E_n - E_0)\ |f_{0n}|^2 = \frac{i\hbar}{2}(\dot{f}f^+ - f^+\dot{f})_{00}. \tag{149.4}$$

我们把它应用于

$$f = \sum_a e^{-i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}_a},$$

根据(19.2)式，$f$ 的时间微商可用以下的算符表出

$$\hat{\dot{f}} = -\frac{\hbar}{2m}\sum_a [e^{-i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}_a}(\mathbf{q}\cdot\nabla_a) + (\mathbf{q}\cdot\nabla_a)e^{-i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}_a}].$$

$\hat{\dot{f}}$ 和 $\hat{f}^+$ 的对易结果很易直接算得:

$$\hat{\dot{f}}\hat{f}^+ - \hat{f}^+\hat{\dot{f}} = -\frac{i\hbar}{m}q^2 Z.$$

代入(149.4)，即得下式

$$\sum_n \frac{2m}{\hbar^2 q^2}(E_n - E_0)\left|\langle n|\sum_a e^{-i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}_a}|0\rangle\right|^2 = Z, \tag{149.5}$$

它已实现了我们所要求的求和计算。①

因此得到关于微分有效滞阻的公式

$$d\kappa = 4\pi\frac{Ze^4}{mv^2}\frac{dq}{q} = \frac{2Ze^4}{mv^2}\frac{do}{\vartheta^2}. \tag{149.6}$$

它的适用范围由以下不等式给出:

$$\left(\frac{v_0}{v}\right)^2 \ll \vartheta \ll 1,\ \text{即}\frac{v_0}{v} \ll a_0 q \ll \frac{v}{v_0}.$$

其次，当动量转移不超过某一值 $q_1$ 而 $v_0/v \ll a_0 q_1 \ll v/v_0$ 时，我们来求所有碰撞的总有效滞阻

$$\kappa(q_1) = \sum_n \int_{q_{\min}}^{q_1} (E_n - E_0)d\sigma_n, \tag{149.7}$$

① 推导这个公式时，我们从来没有利用过指标"0"代表原子基态的事实。因此这个公式对任意的初态都是成立的.

$q_{\min}$ 由(148.11)式给出．式中的积分号不能搬到$\sum\limits_n$的前面，因为 $q_{\min}$ 依赖于 $n$.

我们把积分区间划分成两段，从 $q_{\min}$ 到 $q_0$ 的一段和 $q_0$ 到 $q_1$ 的一段，其中的 $q_0$ 是 $q$ 的某个值，满足 $v_0/v \ll q_0 a_0 \ll 1$．于是在 $q_{\min}$ 到 $q_0$ 的整个积分区间内，我们可用(148.14)式的 $d\sigma_n$:

$$\kappa(q_0)=8\pi\left(\frac{e}{\hbar v}\right)^2\sum_n|\langle n|d_x|0\rangle|^2(E_n-E_0)\int_{q_{\min}}^{q_0}\frac{dq}{q},$$

从而

$$\kappa(q_0)=8\pi\left(\frac{e}{\hbar v}\right)^2\sum_n|\langle n|d_x|0\rangle^2(E_n-E_0)\ln\frac{q_0\hbar v}{E_n-E_0}. \tag{149.8}$$

在 $q_0$ 到 $q_1$ 的区间内，可先对 $n$ 求和，给出(149.6)式的 $d\kappa$，然后对 $q$ 积分，得出

$$\kappa(q_1)-\kappa(q_0)=4\pi\frac{Ze^4}{mv^2}\ln\frac{q_1}{q_0}. \tag{149.9}$$

为了变换以上的表式，我们利用(149.4)得出的求和定理，在该式中令

$$\hat{f}=d_x/e=\sum_a x_a,\ \hat{\dot{f}}=\frac{1}{m}\sum_a\hat{p}_{xa}.$$

把 $\hat{f}^+$ 和 $\hat{\dot{f}}$ 对易（现在的 $\hat{f}^+$ 等于 $\hat{f}$）得出 $\hat{\dot{f}}\hat{f}^+-\hat{f}^+\hat{\dot{f}}=-i\hbar Z/m$，因而①

$$\sum_n N_{0n}\equiv\sum_n\frac{2m}{e^2\hbar^2}(E_n-E_0)|\langle n|a_x|0\rangle|^2=Z. \tag{149.10}$$

量 $N_{0n}$ 称为各个相应跃迁的**振子强度**.

我们引进原子的某个平均能量 $I$，它由下式定义

$$\ln I=\sum_n N_{0n}\ln(E_n-E_0)/\sum_n N_{0n}$$

① (149.5)式的附注对本式也适用.

$$=(1/Z)\sum_n N_{0n}\ln(E_n-E_0). \qquad (149.11)$$

然后应用(149.10)，可把(149.8)改写成 $\kappa(q_0)=(4\pi Ze^4/mv^2)\times \ln(q_0\hbar v/I)$. 此式和(149.9)相加，最后得

$$\kappa(q_1)=\frac{4\pi Ze^4}{mv^2}\ln\left(\frac{q_1\hbar v}{I}\right). \qquad (149.12)$$

此式中只出现一个标志所给原子的常数①.

通过 $q_1=mv\vartheta_1/\hbar$ 用散射角 $\vartheta_1$ 表达 $q_1$，即得所有散射到 $\vartheta\leqslant\vartheta_1$ 区间内的有效滞阻:

$$\kappa(\vartheta_1)=4\pi\frac{Ze^4}{mv^2}\ln(mv^2\vartheta_1/I), \qquad (149.13)$$

如果 $q_1a_0\gg 1$(即$\vartheta_1\gg v_0/v$)，我们可把 $\kappa$ 表成入射电子所能给予原子的最大能量转移值的函数. 我们在上节中曾经指出，$qa_0\gg 1$ 时原子被电离，差不多所有的动量$\hbar\mathbf{q}$和能量都交给了一个原子电子，由于 $\hbar\mathbf{q}$ 和 $\epsilon$ 是一个电子的动量和能量，即有关系 $\epsilon=\hbar^2q^2/2m$. 把 $q_1^2=2m\epsilon_1/\hbar^2$ 代入(149.12)，我们得碰撞中能量转移 $\epsilon\leqslant\epsilon_1$ 的有效滞阻:

$$\kappa(\epsilon_1)=(2\pi Ze^4/mv^2)\ln(2m\epsilon_1v^2/I^2). \qquad (149.14)$$

最后，我们作如下的说明，原子的各个分立谱能级主要来自一个单(外层)电子的激发. 即使是两个电子的激发，它所需要的能量通常足以使该原子电离. 因此，在振子强度的求和式中，跃迁到分立谱态的只是数量级等于1的那一部分；而伴有电离的则构成

---

① 对氢原子，$I=0.55me^4/\hbar^2=14.9$ eV. 对重原子，我们采用托马斯-费米方法计算常数 $I$，可望得到很好的精确性. 很易确立这样算出的 $I$ 值如何依赖于 $Z$. 在准经典情形下，多粒子系统的本征频率相当于它的能级差. 原子的平均本征频率具有 $v_0/a_0$ 的数量级. 由此可知，$I\sim\hbar v_0/a_0$. 托马斯-费米模型中原子电子的速度和 $Z$ 的关系为 $Z^{2/3}$，而原子的线度按 $Z^{-1/3}$变化. 可见 $I$ 必正比于 $Z$：$I=$常数$\times Z$. 根据实验结果发现，这个常数约为 10eV 的数量级.

另一部分，其数量级为 Z. 由此可知，伴有电离的碰撞在滞阻（被重原子滞阻）中起主要作用.

例　　题

试求一个电子被一个氢原子滞阻（$I=0.55$ 原子单位）的总有效滞阻. 对于大的能量转移，两个相碰电子中较快的一个取作初级电子.

**解** 当碰撞后的初级电子和次级电子具有差不多大小的能量时，必须计及交换效应. 因此，对于能量转移介于某值 $\epsilon_1(1\ll\epsilon_1\ll v^2)$ 和最大值

$$\epsilon_{max}=\frac{1}{2}E=\frac{1}{4}v^2$$

（根据我们对初级电子的定义）之间的滞阻讲来，我们须采用（148.17）式的有效截面：

$$\begin{aligned}&\kappa(\epsilon_{max})-\kappa(\epsilon_1)\\&=\frac{\pi}{E}\int_{\epsilon_1}^{\frac{1}{2}E}\epsilon\left[\frac{1}{\epsilon^2}+\frac{1}{(E-\epsilon)^2}-\frac{1}{\epsilon(E-\epsilon)}\right]d\epsilon\\&=\frac{\pi}{E}\left[\ln\left(\frac{E}{8\epsilon_1}\right)+1\right].\end{aligned}$$

此式加到（149.14）式上，我们得①（用原子单位）

$$\kappa=\frac{4\pi}{v^2}\ln\left[\frac{v^2}{2I}\sqrt{\frac{1}{2}\epsilon}\right]=\frac{4\pi}{v^2}\ln\frac{v^2}{1.3}.$$

## §150　重粒子和原子的非弹性碰撞

玻恩近似适用于重粒子和原子碰撞的条件，用粒子的速度表示这个条件，则仍和电子的情形一样：

$$v\gg v_0.$$

这可根据微扰论适用性的普遍条件（$Ua_0/\hbar v\ll1$）立即得出，只要注

① 对于正电子和氢原子的碰撞，没有交换效应，把（149.14）式中的 $\epsilon_1$ 简单地代以 $\epsilon_{max}=E=\frac{1}{2}v^2$，即得总滞阻

$$\kappa=\frac{4\pi}{v^2}\ln\left(\frac{v^2}{0.55}\right).$$

意到这个条件中不出现粒子质量，而$Ua_0/\hbar$具有原子中电子速度的数量级.

在粒子和原子的质心为静止的坐标系中，截面由一般公式(148.3)给出，式中的$m$目前是粒子和原子的折合质量．但为方便计，我们考虑碰撞前的原子处于静止的坐标系．为此，我们从(148.1)式出发．在碰撞前原子为静止的坐标系中，表达能量守恒律的$\delta$函数的宗量具有以下形式:

$$\frac{1}{2M}p'^2-\frac{1}{2M}p^2+\frac{1}{2M_a}(\mathbf{p}'-\mathbf{p})^2+E_n-E_0, \tag{150.1}$$

式中$M$是入射粒子质量，而$M_a$是原子质量．第三项是原子的反冲动能(考虑原子和电子的碰撞时，这一项可以完全略去).

对于快速重粒子和原子的碰撞，粒子的动量改变和它的初始动量相比，差不多总是很小．如果这个条件成立，我们可以略去$\delta$函数宗量中的原子反冲能量，得到和(148.3)完全一样的公式，只是该式中的$m$必须改成入射粒子的质量$M$(不是粒子和原子的折合质量)．考虑到动量转移与初始动量相比已经假定为很小，我们可令$p\approx p'$，于是在碰撞前原子为静止的坐标系中，截面式为

$$d\sigma_n=(M^2/4\pi^2\hbar^4)\left|\iint Ue^{-i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}}\psi_n^*\psi_0 d\tau dV\right|^2 do. \tag{150.2}$$

考虑到粒子的电荷可能不同于电子，我们用$ze^2$代替$e^2$，其中$ze$为入射粒子的电荷．非弹性散射的一般公式，写成(148.9)的形式:

$$d\sigma_n=8\pi\left(\frac{ze^2}{\hbar v}\right)^2\left|\langle n|\sum_a e^{-i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}_a}|0\rangle\right|^2\frac{dq}{q^3} \tag{150.3}$$

并不含有粒子质量．由此可见，从它导出的所有公式对重粒子的碰撞仍能适用，只要这些公式是通过$v$和$q$表达的.

不难看出，用散射角$\vartheta$(重粒子和原子相撞后的偏转角)表达的公式应作怎样的修改．为此，我们首先注意到，重粒子的非弹性

碰撞中 $\vartheta$ 角总是很小的. 因为, 当动量转移很大时(与原子中电子的动量相比), 我们可以把和原子的非弹性碰撞看作是和自由电子的弹性碰撞. 可是, 当一重粒子和一轻粒子(电子)碰撞时, 重粒子几乎是不偏离的. 换句话说, 重粒子转移给原子的动量与该粒子的初始动量相比是很小的. 大角度弹性散射是一个例外, 但这种可能性是极小的.

因此, 在整个角度范围内我们可令

$$q=\frac{1}{\hbar}\sqrt{\left(\frac{E_n-E_0}{v}\right)^2+(Mv\vartheta)^2}, \tag{150.4}$$

除了极小的角度外, 上式实际上可化成

$$q\hbar\approx Mv\vartheta \tag{150.5}$$

另一方面, 当我们考虑电子和原子的碰撞时, 我们有(对于小角度)

$$q=\frac{1}{\hbar}\sqrt{\left(\frac{E_n-E_0}{v}\right)^2+(mv\vartheta)^2}.$$

由此可得这样的结论, 从电子和原子碰撞中所得的公式, 只要这些公式用速度和偏转角表达出来, 那么如果到处进行以下替代:

$$\vartheta\to M\vartheta/m \tag{150.6}$$

(包括立体角元 $do=2\pi\sin\vartheta d\vartheta\approx2\pi\vartheta d\vartheta$ 的替代), 就变成重粒子碰撞的公式, 入射粒子的速度仍保持不变. 定性地说, 这意味着小角度散射的整个图像 (对给定的粒子速度而言) 被压缩了 $m/M$倍.

以上所得的规则也和小角度弹性散射有关. 对 $\vartheta\ll1$ 的(139.4)式作(150.6)式的变换, 我们得截面

$$d\sigma_e=8\pi\left(\frac{ze^2}{Mv^2}\right)^2[Z-F(Mv\vartheta/\hbar)]^2\frac{d\vartheta}{\vartheta^3}. \tag{150.7}$$

角度 $\vartheta\sim1$ 的重粒子弹性散射, 被化成在原子核上的卢瑟福散射.

具有大动量转移而原子被电离的非弹性散射需要作特殊的考虑. 和被电子所电离的情况不同, 这里当然没有交换效应. 重粒子的特征是, 大的动量转移($qa_0\gg1$)并不意味着大的偏转角, $\vartheta$ 总

是保持很小．辐射电子的能量介于 $\epsilon$ 和 $\epsilon+d\epsilon$ 之间的电离截面可从(148.25)式直接得出，它可写成以下形式：

$$d\sigma_r=8\pi(ze^2/\hbar v)^2 Zdq/q^3,$$

令 $\hbar^2q^2/2m=\epsilon$（整个动量 $\hbar\mathbf{q}$ 交给了一个原子电子）．此式给出

$$d\sigma_\epsilon=(2\pi Zz^2e^4/mv^2)d\epsilon/\epsilon^2. \qquad (150.8)$$

在重粒子和原子的碰撞中，总截面和有效滞阻特别有用．非弹性散射总截面由以前的(148.26)式给出．总有效滞阻可把(149.12)式中的 $q_1$ 改成最大动量转移 $q_{max}$ 后得到．$q_{max}$ 很易用粒子速度表出，方法如下．由于 $\hbar q_{max}$ 与粒子原动量 $Mv$ 相比仍是很小，它的能量变化和动量变化的关系为 $\Delta E=\mathbf{v}\cdot\hbar\mathbf{q}$．另一方面，对于大的动量转移，这个能量几乎都交给了一个原子电子，因此可写成

$$\epsilon=\hbar^2q^2/2m=\hbar\mathbf{v}\cdot\mathbf{q}\leqslant\hbar vq,$$

从而有 $\hbar q\leqslant 2mv$，即

$$\hbar q_{max}=2mv,\quad \epsilon_{max}=2mv^2. \qquad (150.9)$$

我们注意，非弹性碰撞中粒子的最大偏转角为

$$\vartheta_{max}=\hbar q_{max}/Mv=2m/M.$$

(150.9)代入(149.12)中，我们得到重粒子的总有效滞阻

$$\kappa=(4\pi Zz^2e^4/mv^2)\ln(2mv^2/I). \qquad (150.10)$$

## §151 中子散射

在碰撞理论的许多物理问题中，需要考虑到散射过程怎样受散射中心运动的影响．在一定的条件下，这类问题可以用费密(E. Fermi, 1936)建议的那种微扰论解决，即使单独讲来微扰论对每个中心的散射并不适用．这类问题中包括慢中子对多原子系统(例如分子)的散射．我们来考虑这个特殊问题．

中子几乎不被电子散射，所以实际上所有的散射都发生在原

子核处①．我们将假定被单个核散射的振幅小于原子间距．那么在分子中被每个核散射的波幅即使在别的原子核处也已经很小．在这些条件下，被分子散射的振幅等于被单个核散射的振幅之和．

微扰论一般讲来不能应用于中子和核的散射：尽管核力的范围很小，在此范围内的作用却极强．但重要的是，慢中子(其波长远大于原子核线度)散射的振幅是一个和速度无关的常数．令$f_a$为被第$a$个核散射的振幅，$|f_a|^2do$是中子被一个自由核弹性散射的微分截面(在它们的质心系中)．

这个常数振幅可从微扰论形式地得到，如果我们用一个“点”势来描写中子和核的相互作用的话：

$$U(\mathbf{r})=-\frac{2\pi\hbar^2}{M}f\delta(\mathbf{r}), \tag{151.1}$$

式中$M$是中子和核的折合质量．当此式代入玻恩公式(126.4)中时，$\delta$函数使得积分式成为与$\mathbf{q}$无关的一个常数．这样定义的“场”$U(\mathbf{r})$被称为**赝势**．需要强调的是，作出这个定义的可能性是由于$f$为常数这一事实．在中子能量为任意的一般情形下，散射振幅分别依赖于初动量$\mathbf{p}$和末动量$\mathbf{p}'$，而不只是依赖于两者之差$\mathbf{q}$，但玻恩近似给出的振幅却只能依赖于②$\mathbf{q}$．

如果散射核在作给定的运动(例如，分子中的各种振动)，我们对此运动求平均后，则(151.1)式的相互作用势被“铺展”到一个尺度一般地远大于散射振幅$f$的范围内．对于这样“铺展”开的作用势讲来，玻恩近似的适用条件(126.1)是满足的．

---

① 我们还假定该分子没有磁矩．否则还存在着来自中子和分子磁矩相互作用的特殊散射效应．

② 需要强调的是，尽管赝势在形式地应用微扰论的情况下能够给出散射振幅的正确值，但这并不意味着微扰论真能适用于这样的场．对于一个深度为$U_0$并以$U_0a^3=$常数的方式趋于无穷远的势阱讲来($a$为阱半径，它趋于零)，条件(126.1)，(126.2)肯定都不会满足．

因此我们可以用以下赝势描写中子-分子作用:

$$U(\mathbf{r}) = -2\pi\hbar^2 \sum_a \frac{1}{M_a} f_a \delta(\mathbf{r} - \mathbf{R}_a), \tag{151.2}$$

式中对分子的所有原子核求和，$\mathbf{R}_a$是它们的径矢，$\mathbf{r}$是中子的径矢. 把上式代入(148.3)，把$m$改成$M_m$($M_m$是分子和中子的折合质量)，我们得质心系中的中子被分子散射的以下截面式:

$$d\sigma_n = M_m^2 \frac{p'}{p} \left| \sum_a \frac{1}{M_a} f_a \langle n | e^{-i\mathbf{q}\cdot\mathbf{R}_a} | 0 \rangle \right|^2 do, \tag{151.3}$$

式中的矩阵元是针对能量为$E_0$和$E_n$的核运动定态波函数而言的，动量$p$和$p'$通过能量守恒律相联系:

$$\frac{1}{2M_m}(p^2 - p'^2) = E_n - E_0.$$

(151.3)式描写了分子中的核运动状态具有特定变化($0\to n$跃迁)的非弹性碰撞，也就是所述问题的解: 从中子对自由核散射的振幅(假定为已知)出发，计及核的内禀运动以及各个核散射之间的干涉效应，求出了中子被分子散射的截面.

如果核自旋不等于零，还应考虑到散射振幅$f_a$依赖于中子和散射核的总自旋这样的事实. 它的做法如下.

核和中子的总自旋可取$j_a = i_a \pm \frac{1}{2}$两个值，$i_a$是核自旋。相应的散射振幅记作$f_a^+$和$f_a^-$. 我们来构造一个自旋算符，对于给定的$j_a$值，它的本征值分别为$f_a^+$和$f_a^-$. 这个算符就是

$$\hat{f}_a = a_a + b_a \hat{\mathbf{s}} \cdot \hat{\mathbf{i}}_a, \tag{151.4}$$

其中$\hat{\mathbf{i}}_a$和$\hat{\mathbf{s}}_a$是核和中子的自旋算符，系数$a_a$和$b_a$由下式给出:

$$\left.\begin{aligned} a_a &= \frac{1}{2i_a+1}[(i_a+1)f_a^+ + i_a f_a^-], \\ b_a &= \frac{2}{2i_a+1}(f_a^+ - f_a^-). \end{aligned}\right\} \tag{151.5}$$

这是很易证明的，只要注意到对于给定的$j$值，算符$\hat{\mathbf{s}}\cdot\hat{\mathbf{i}}$的本征

值为

$$\mathbf{s}\cdot\mathbf{i}=\frac{1}{2}\left[j(j+1)-i(i+1)-\frac{3}{4}\right].$$

应把算符(151.4)取代(151.3)式中的$f_a$，并取对应于所考虑跃迁的矩阵元．如果入射中子和靶核都是非极化的，那末散射截面必须进行适当的平均．

## 例　　题

1．假定中子和核的自旋方向都是毫无规则地分布的，分子中所有的核都不相同，试对(151.3)式进行平均．

**解**　对中子的和核的自旋方向求平均是相互独立的，每一种自旋平均后得零，从而$\overline{\mathbf{s}\cdot\mathbf{i}_a}=0$．如果分子中没有两个原子是相同的，这就没有核自旋的交换作用，又由于它们的直接相互作用可以忽略，分子中各个核的自旋方向可以看作是独立的，因而$(\mathbf{s}\cdot\mathbf{i}_1)(\mathbf{s}\cdot\mathbf{i}_2)$等形状的乘积平均后也得零．对于平方$(\mathbf{s}\cdot\mathbf{i})^2$有

$$\overline{(\mathbf{s}\cdot\mathbf{i})^2}=\frac{1}{3}\mathbf{s}^2\cdot\mathbf{i}^2=\frac{1}{3}s(s+1)i(i+1)=\frac{1}{4}i(i+1),$$

由此得以下平均截面式：

$$d\sigma_n=M_m^2\frac{p'}{p}\Big[\Big|\sum\frac{1}{M_a}a_a\langle n|e^{-i\mathbf{q}\cdot\mathbf{R}_a}|0\rangle\Big|^2+$$

$$+\frac{1}{4}\sum_a\frac{i_a(i_a+1)}{M_a^2}b_a^2|\langle n|e^{-i\mathbf{q}\cdot\mathbf{R}_a}|0\rangle|^2\Big]do.$$

2．试将(151.3)式应用于慢中子对正氢和仲氢的散射（J. Schwinger, E. Teller, 1937）

**解**　在取自旋算符的矩阵元以前，对氢分子散射的(151.3)式为

$$d\sigma_n=\frac{16}{9}\frac{p'}{p}\left|a\langle n|e^{-i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}/2}+e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}/2}|0\rangle\right.$$

$$\left.+b\hat{\mathbf{s}}\cdot\langle n|\hat{\mathbf{i}}_1e^{-i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}/2}+\hat{\mathbf{i}}_2e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}/2}|0\rangle\right|^2do, \tag{1}$$

$$a=\frac{1}{4}(3f^++f^-),\quad b=f^+-f^-,$$

$\pm\mathbf{r}/2$是分子中两个核相对于其质心的径矢．

分子的转动和振动态由量子数$K$，$M_k$，$v$（它们的集合在(1)式中用$n$表

出)所定义，在 $H_2$ 分子的电子基态中，仅当总的核自旋 $I=0$(仲氢)时 $K$ 才能取偶数值；仅当 $I=1$(正氢) 时 $K$ 才能取奇数值. 因此有必要区分两种情况；(1) $K$ 的奇偶相同的两个转动态之间的跃迁，这只有 $I$ 值不变才行(正—正和仲—仲跃迁) (2) $K$ 的奇偶不同的两个态之间的跃迁，这只有改变 $I$ 值才行(正—仲和仲—正跃迁). 第一种情况下我们有

$$\langle n|e^{-i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}/2}|0\rangle=\langle n|e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}/2}|0\rangle=\langle n|\cos\frac{1}{2}\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}|0\rangle$$

应当记住的是，$\mathbf{r}$ 变号后转动波函数要乘以 $(-1)^K$. (1)式的自旋算符则变成 $2a+b\hat{\mathbf{s}}\cdot\hat{\mathbf{I}}$, 其中 $\hat{\mathbf{I}}=\hat{\mathbf{i}}_1+\hat{\mathbf{i}}_2$, 根据前面的讨论，这个算符对 $I$ 是对角的. 对 $(2a+b\mathbf{s}\cdot\mathbf{I})^2$ 的平均和题 1 一样，给出

$$4a^2+\frac{1}{4}b^2I(I+1).$$

结果是

$$d\sigma_n=\frac{4}{9}\frac{p'}{p}|\langle n|\cos\frac{1}{2}\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}|0\rangle|^2[(3f^++f^-)^2$$
$$+I(I+1)(f^++f^-)^2]do. \qquad (2)$$

第二种情形下

$$\langle n|e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}/2}|0\rangle=-\langle n|e^{-i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}/2}|0\rangle=i\langle n|\sin\frac{1}{2}\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}|0\rangle$$

(1)式的自旋算符成为 $\hat{\mathbf{s}}\cdot(\hat{\mathbf{i}}_1-\hat{\mathbf{i}}_2)$, 它只有 $I$ 的非对角矩阵元. 这些矩阵元的模量平方值对末态总自旋 $\mathbf{I}'$ 的所有分量求和时，可按 $(\mathbf{s}\cdot(\mathbf{i}_1-\mathbf{i}_2)]^2$ 的平均值(对角元)算出(见 344 页注①)：

$$\overline{[\mathbf{s}\cdot(\mathbf{i}_1-\mathbf{i}_2)]^2}=\frac{1}{3}\cdot\frac{3}{4}\overline{(\mathbf{i}_1-\mathbf{i}_2)^2}$$
$$=\frac{1}{4}(2\mathbf{i}_1^2+2\mathbf{i}_2^2-\mathbf{I}^2)=\frac{1}{4}[3-I(I+1)].$$

结果是

$$d\sigma_n=(1)(3)\frac{4}{9}\frac{p'}{p}|\langle n|\sin\frac{1}{2}\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}|0\rangle|^2(f^+-f^-)^2do, \qquad (3)$$

式中的系数 1 出现于正—仲跃迁，系数 3 出现于仲—正跃迁.

如果中子很慢，它的波长甚至远超过分子的线度，则可令(2)和(3)式矩阵元中的 $\cos\left(\frac{1}{2}\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}\right)=1$, $\sin\left(\frac{1}{2}\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}\right)=0$, 结果除 00 对角元外都等于零. 这些条件下，当然只可能有弹性散射. 这时的弹性散射截面为

$$d\sigma_e=\frac{4}{9}[(3f^++f^-)^2+I(I+1)(f^+-f^-)^2]do.$$

3. 求中子对一束缚质子的散射截面，该质子可看作频率为$\omega$的各向同性三维振子(E. Fermi, 1936).

**解** 考虑质子绕空间某一固定点振动着，根据(151.3)式的推导，必须令该式中的 $M_m=M$, $M_a=\frac{1}{2}M$ ($M$为质子质量). 于是

$$d\sigma_n=\frac{p'}{p}\frac{\sigma_0}{\pi}\Sigma\left|\int e^{-i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}}\psi_{000}(\mathbf{r})\psi_{n_1n_2n_3}(\mathbf{r})dV\right|^2do,$$

式中的 $\sigma_0=4\pi|f|^2$ 是对自由质子的散射截面，$\psi_{n_1n_2n_3}$ 是三维振子的本征函数，对应于能级 $E_n=\hbar\omega(n+3/2)$；$\Sigma$是对和量给定为 $n$ 的所有 $n_1$, $n_2$ 和 $n_3$ 值求和. $\psi_{n_1n_2n_3}$ 函数组是三个线性振子波函数的乘积(见§33, 题4). 所求的积分因而可分解成为以下形式的三个积分的乘积

$$\int_{-\infty}^{\infty}e^{-iq_xx/2}e^{-\alpha^2x^2/2}e^{-\alpha^2x^2/2}H_{n_1}(\alpha x)dx$$

($\alpha=\sqrt{M\omega/\hbar}$), 把(a. 4)式的 $H_{n_1}(x)$ 代入上式并分部积分 $n_1$ 次，结果为

$$d\sigma_n=\frac{1}{\pi}\frac{v'}{v}\frac{\sigma_0}{2^n\alpha^{2n}}\Sigma\frac{q_x^{2n_1}q_y^{2n_2}q_z^{2n_3}}{n_1!n_2!n_3!}e^{-q^2/2\alpha^2}do.$$

按二项式定理进行求和后，最后结果为

$$d\sigma_n=\frac{\sigma_0}{\pi n!}\sqrt{\frac{E'}{E}}\left(\frac{q^2}{2\alpha^2}\right)^n e^{-q^2/2\alpha^2}do.$$

特别是，弹性散射截面($n=0$, $E=E'$)为

$$d\sigma_e=\frac{\sigma_0}{\pi}e^{-q^2/2\alpha^2}do,\qquad \sigma_e=\sigma_0\frac{\hbar\omega}{E}(1-e^{-4E/\hbar\omega}),$$

当 $E/\hbar\omega\to0$ 时，$\sigma_e\to4\sigma_0$.

## §152 高能非弹性散射

§131 中对两个粒子相互散射问题所用的程函近似，也能推广到包括一个快粒子和一个多粒子系统或“靶”的碰撞(包括非弹性)过程(R. J. Glauber, 1958).

这个推广中，所假定的原则和以前一样. 入射粒子的能量 $E$ 假定很大，使得 $E\gg|U|$ 和 $ka\gg1$，其中$U$是这个粒子和靶粒子间

的相互作用能量，$a$ 是此相互作用的方程．我们考虑动量转移比较小的散射：入射粒子的动量改变 $\hbar\mathbf{q}$ 和它的原有值 $\hbar\mathbf{k}$ 相比很小($q\ll k$)．这个条件现在不但使得散射角很小，并且还使能量转移也比较小．

我们还将假定入射粒子的速度 $v$ 远大于靶内粒子的速度 $v_0$:

$$v\gg v_0. \tag{152.1}$$

对于带电粒子和原子的散射讲来，此条件等价于玻恩近似的适用条件(参考§148和§150)：
如果 $v\gg v_0$，一定有$|U|a/\hbar v\ll 1$．因此在该情形下不需要本节的理论．但对核靶讲来，粒子间结合的不是库仑力而是核力，情况就不同了．我们将讨论一个快粒子被核散射这一特殊情形①．

条件 (152.1) 使我们有可能考虑入射粒子相对于核中位置固定的各个核子而言的运动问题②，这就是说，粒子-靶系统的波函数可以写成

$$\psi(\mathbf{r},\mathbf{R}_1,\mathbf{R}_2,\cdots)=\varphi(\mathbf{r};\mathbf{R}_1,\mathbf{R}_2,\cdots)\Phi_i(\mathbf{R}_1,\mathbf{R}_2,\cdots), \tag{152.2}$$

其中 $\Phi_i(\mathbf{R}_1,\mathbf{R}_2,\cdots)$是原子核第 $i$ 个内态的波函数；$\mathbf{R}_1\mathbf{R}_2\cdots$是核内各个核子的径矢．因子 $\varphi(\mathbf{r};\mathbf{R}_1,\mathbf{R}_2\cdots)$是正在进行散射的粒子波函数($\mathbf{r}$ 是它的径矢)，具有给定的 $\mathbf{R}_1,\mathbf{R}_2,\cdots$值，这些值是以下薛定谔方程中的参量：

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta+\sum_a U_a(\mathbf{r}-\mathbf{R}_a)\right]\varphi=\frac{\hbar^2k^2}{2m}\varphi, \tag{152.3}$$

其中 $U_a(\mathbf{r}-\mathbf{R}_a)$是该粒子和第 $a$ 个核子的作用能量，而 $\hbar\mathbf{k}$ 是粒子在无穷远处的动量③．

---

① 条件(152.1) 给出的是任一重核的相对论速度 $v$．在目前的非相对论理论表述中，我们不考虑它对任一特殊散射过程的实际适用性问题．

② 这个近似类似于分子理论所根据的那种近似，即分子中的电子态是针对各个原子核的固定位置来考虑的．

③ (152.3)式中假定了粒子和核的作用等于它和各单个核子的两体作用之和．

如果我们求出了具有以下渐近式的(152.3)式之解:

$$\varphi=e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}+F(\mathbf{n}',\mathbf{n};\mathbf{R}_1,\mathbf{R}_2,\cdots)e^{ikr}/r \tag{152.4}$$

(式中 $\mathbf{n}'=\mathbf{r}/r$, $\mathbf{n}=\mathbf{k}/k$), 则(152.2)式的波函数

$$\psi=e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}\Phi_i+F\Phi_i e^{ikr}/r \tag{152.5}$$

将描写对碰撞前处于第 $i$ 个态的原子核所进行的散射: 入射波 $e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}$ 在 (152.5)式中作为 $\Phi_i$ 的相乘因子出现. (152.5)式中的第二项代表散射波. 但是,仅当入射粒子的能量改变足够小,也就是核的内能变化足够小时,用这个式子来求散射振幅才是合适的.因此,把粒子考虑成为是在“刚性固定”的核子组的恒定场中运动(相当于方程(152.3))时,我们就略去了这种运动可能的能量变化.

为了把核的内态具有特定变化的散射振幅分离出来, 应把 $\psi$ 写成以下形式:

$$\psi=e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}\Phi_i+\sum_f f_{fi}(\mathbf{n}',\mathbf{n})\Phi_f e^{ikr}/r, \tag{152.6}$$

式中对原子核的各个态求和, $f_{fi}(\mathbf{n}',\mathbf{n})$则给出待求的原子核具有特定跃迁 $i\to f$ 的散射振幅,它是散射角($\mathbf{n}$ 和 $\mathbf{n}'$ 的夹角)的函数. 比较(152.6)和(152.5)得

$$f_{fi}(\mathbf{n}',\mathbf{n})=\int\Phi_f^*F\Phi_i d\tau, \tag{152.7}$$

其中 $d\tau=d^3R_1d^3R_2\cdots$是原子核位形空间中的体积元. 我们必须再一次强调,这个公式仅当 $i$ 和 $f$ 态的能量相差比较小时才能成立.

方程(152.3) 之解(152.4)本身, 可用 §131 中描述的方法求出①. 类似于(131.7)式,我们有

① §131中曾经指出,波函数的初始表式(131.4)只在 $z\ll ka^2$ 的距离处成立.这一点在 §131的进一步推导中并不重要. 但对一个多粒子系统(例如一个原子核)的散射讲来,它会导致另一种限制: (131.4)式必须在散射系统所占的整个体积内成立,也就是说,我们必须有 $R_0\ll ka^2$,其中 $R_0$ 是原子核半径, $a$ 是势 $U$ 的力程.

$$F(\mathbf{n}', \mathbf{n}; \mathbf{R}_1, \mathbf{R}_2\cdots) = \frac{k}{2\pi_i}\int[S,(\boldsymbol{\rho}, \mathbf{R}_1, \mathbf{R}_2, \cdots)-1]e^{-i\mathbf{q}\cdot\boldsymbol{\rho}}d^2\rho,$$

(152.8)

其中

$$\left.\begin{aligned} S(\boldsymbol{\rho}, \mathbf{R}_1, \mathbf{R}_2, \cdots) &= \exp[2i\delta(\boldsymbol{\rho}, \mathbf{R}_1, \mathbf{R}_2, \cdots)], \\ \delta(\boldsymbol{\rho}, \mathbf{R}_1, \mathbf{R}_2, \cdots) &= \sum_a \delta_a(\boldsymbol{\rho} - \mathbf{R}_{a\perp}), \\ \delta_a(\boldsymbol{\rho} - \mathbf{R}_{a\perp}) &= -\frac{1}{2\hbar v}\int_{-\infty}^{\infty} U_a(\mathbf{r} - \mathbf{R}_a)dz. \end{aligned}\right\} \quad (152.9)$$

记得 $\boldsymbol{\rho}$ 是径矢 $\mathbf{r}$ 在(垂直于 $\mathbf{k}$ 的)$xy$ 平面内的分量, $\mathbf{R}_{a\perp}$是径矢 $\mathbf{R}_a$ 的上述相应分量: $\hbar\mathbf{p} = \mathbf{p}' - \mathbf{p}$ 是散射粒子的动量改变, (152.8)式中只出现它的横分量. 函数 $\delta_a$确定粒子被单个自由核子弹性散射的振幅:

$$f^{(a)} = \frac{k}{2\pi i}\int\{e^{2i\delta_a(\rho)} - 1\}e^{-i\mathbf{q}\cdot\boldsymbol{\rho}}d^2\rho. \quad (152.10)$$

当 $i=f$ 时, (152.7)和(152.8)给出被原子核弹性散射的振幅:

$$f_{ii}(\mathbf{n}', \mathbf{n}) = \frac{k}{2\pi i}\int[\bar{S}(\boldsymbol{\rho}) - 1]e^{-i\mathbf{q}\cdot\boldsymbol{\rho}}d^2\rho, \quad (152.11)$$

式中的横线代表对原子核的内态求平均:

$$\bar{S}(\boldsymbol{\rho}) = \int S(\boldsymbol{\rho}, \mathbf{R}_1, \mathbf{R}_2, \cdots)\,|\,\Phi_i(\mathbf{R}_1, \mathbf{R}_2, \cdots)\,|^2 d\tau, \quad (152.12)$$

此式推广了前面的(131.7)式.

令(152.11)式中的 $\mathbf{n}' = \mathbf{n}$ 并应用(142.10)式的光学定理, 我们得散射总截面

$$\sigma_t = 2\int(1 - \mathrm{Re}\bar{S})\,d^2\rho. \quad (152.13)$$

弹性散射全截面 $\sigma_e$ 是由$|f_{ii}|^2$ 对 $\mathbf{n}'$的方向积分后得到的. 对于小的散射角 $\theta$, 我们有 $q \approx k\theta$, 立体角元 $do \approx d^2q/k^2$. 因而

$$\sigma_e = \int|f_{ii}|^2 d^2q/k^2.$$

采用(152.11)式的 $f_{ii}$，把 $f^*_{ii}f_{ii}$ 写成 $d^2\rho d^2\rho'$ 的一个重积分，利用下式可实行对 $d^2q$ 的积分：

$$\int e^{-i\mathbf{q}\cdot(\boldsymbol{\rho}-\boldsymbol{\rho}')}d^2q=(2\pi)^2\delta(\boldsymbol{\rho}-\boldsymbol{\rho}'),$$

这个 $\delta$ 函数在对 $d^2\rho'$ 的积分中被积掉。结果为

$$\sigma_e=\int|\bar{S}-1|^2d^2\rho. \tag{152.14}$$

反应总截面为

$$\sigma_r=\sigma_t-\sigma_e=\int(1-|\bar{S}|^2)d^2\rho. \tag{152.15}$$

注意(152.13)—(152.15)是和一般公式(142.3)—(142.5)一致的：对后者把求和(对大的 $l$ 求和)改成对 $\rho=l/k$ 的 $d^2\rho$ 求积分，并把 $S_l$ 改成 $\bar{S}(\rho)$ 函数，我们就得(152.13)—(152.15)。

## 例　题

1. 试把一个快粒子被一个氘核弹性散射的振幅用该快粒子对质子和中子的散射振幅表达出来(R. J. Glauber, 1955).

**解**　根据(152.11)，被氘核弹性散射的振幅为

$$f^{(d)}(\mathbf{q})=\frac{k}{2\pi i}\int|\psi_d(\mathbf{R})|^2\left\{\exp\left[2i\delta_n\left(\boldsymbol{\rho}-\frac{1}{2}\mathbf{R}_\perp\right)\right.\right.$$
$$\left.\left.+2i\delta_p\left(\boldsymbol{\rho}+\frac{1}{2}\mathbf{R}_\perp\right)\right]-1\right\}e^{-i\mathbf{q}\cdot\boldsymbol{\rho}}d^3Rd^2\rho, \tag{1}$$

其中 $\psi_d(\mathbf{R})$ 为氘核中中子($n$)和质子($p$)的相对运动波函数；$\mathbf{R}=\mathbf{R}_n-\mathbf{R}_p$，$\mathbf{R}_\perp$ 是 $\mathbf{R}$ 在入射粒子波矢 $\mathbf{k}$ 的垂直平面上的分量。(1)式大括号内的差量可以写成

$$\exp(2i\delta_n+2i\delta_p)-1=(e^{2i\delta_n}-1)+(e^{2i\delta_p}-1)$$
$$+(e^{2i\delta_n}-1)(e^{2i\delta_p}-1).$$

采用中子 $f^{(n)}$ 和质子 $f^{(p)}$ 的散射振幅定义，根据(152.10)及其逆式

$$\exp[2i\delta_a(\boldsymbol{\rho})]-1=\frac{2\pi i}{k}\int f^{(a)}(\mathbf{q})e^{i\mathbf{q}\cdot\boldsymbol{\rho}}d^2q/(2\pi)^2,$$

可对积分(1)进行变换，结果为

$$f^{(d)}(\mathbf{q})=f^{(n)}(\mathbf{q})F(\mathbf{q})+f^{(p)}(\mathbf{q})F(-\mathbf{q})$$

$$-\frac{1}{2\pi ik}\int F(2\mathbf{q}')f^{(n)}\left(\frac{1}{2}\mathbf{q}+\mathbf{q}'\right)f^{(p)}\left(\frac{1}{2}\mathbf{q}-\mathbf{q}'\right)d^2q', \tag{2}$$

其中

$$F(\mathbf{q})=\int|\psi_d(\mathbf{R})|^2e^{-i\mathbf{q}\cdot\mathbf{R}/2}d^3R$$

是氘核形状因子.

(2) 式中令 $\mathbf{q}=0(F(0)=1)$ 并用(142.10)式的光学定理, 求得氘核散射总截面

$$\sigma_t^{(d)}=\sigma_t^{(n)}+\sigma_t^{(p)}+\frac{2}{k^2}\mathrm{Re}\int F(2\mathbf{q})f^{(n)}(\mathbf{q})f^{(p)}(-\mathbf{q})d^2q. \tag{3}$$

2. 求一个快氘核被一个半径为 $R_0$ 的重吸收核散射后蜕变成为一个中子和一个质子的截面, 其中 $R_0$ 远大于氘核波长($kR_0\gg1$, 其中 $\hbar\mathbf{k}$ 是氘核动量)也远大于氘核半径(Е. Л. Фейнберг, 1954; R. J. Glauber, 1955; А. И. Ахиезер; А. Г. Сименко 1955).

**解** 把入射氘核看作平面波, 大吸收核($kR_0\gg1$)起着使波衍射的不透明屏幕的作用. 入射氘核的波函数为 $e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}\psi_d(R)$, 其中 $\psi_d(R)$ 是氘核的内部波函数[$\mathbf{R}=\mathbf{R}_n-\mathbf{R}_p$ 是核内中子到质子的径矢, $\mathbf{r}=\frac{1}{2}(\mathbf{R}_n+\mathbf{R}_p)$ 是它们的质心的径矢]. 吸收核的存在"移去"了这个函数中的一个部分, 这部分的中子和质子横向坐标($\boldsymbol{\rho}_n$ 和 $\boldsymbol{\rho}_p$)位于原子核的"阴影"区内, 即半径为 $R_0$ 的圆内. 因此波函数变成

$$\psi=e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}S(\boldsymbol{\rho}_n,\boldsymbol{\rho}_p)\psi_d(R),$$

当 $\rho_n$, $\rho_p\geqslant R_0$ 时式中的 $S=1$, 而当 $\rho_n$ 或 $\rho_p$ 小于 $R_0$ 时 $S=0$①. 这个波函数若没有因子 $\psi_d$, 则相当于(131.5)形式的入射波表示式(略去衍射对射线的弯曲), 因而 $S$ 因子具有和 § 131 及 § 152 中同样的含义.

类似于(152.13)和(152.14)式, 氘核散射的总截面 $\sigma_t$(包括所有的非弹性过程)和弹性散射截面 $\sigma_e$ 分别为

$$\sigma_t=2\int(1-\bar{S})d^2\rho,\quad \sigma_e=\int(\bar{S}-1)^2d^2\rho,$$

式中 $\boldsymbol{\rho}=\frac{1}{2}(\boldsymbol{\rho}_n+\boldsymbol{\rho}_p)$ 并且应用了 $S$ 为实量的事实. $S$ 的平均是对氘核基态

① 氘和原子核的库仑作用已略去.

而言的：

$$\bar{S}(\rho)=\int S\psi_d^2 d^3R.$$

至于 $\psi_d$，采用以下函数就足够了：

$$\psi_d=\sqrt{\frac{\kappa}{2\pi}}\frac{e^{-\kappa R}}{R},$$

此式在中子和质子间核力的力程外距离 $R$ 处成立（参考（133.14）式；$\kappa=\sqrt{m|\epsilon|}/\hbar$，$|\epsilon|$ 是氘核的结合能，$m$ 是核子质量）. 根据 $S$ 的定义，如果有一个核子或者两个核子都进入半径为 $R_0$ 的圆内并被原子核吸收掉，则 $1-S$ 不等于零：从而

$$\sigma_{俘获}=\int(1-\bar{S})d^2\rho=\frac{1}{2}\sigma_t \tag{1}$$

为俘获一个或两个核子的截面. 另一方面，$\sigma_t=\sigma_{俘获}+\sigma_e+\sigma_{蜕变}$，其中 $\sigma_{蜕变}$ 为待求的氘核"衍射"蜕变截面. 故

$$\sigma_{蜕变}=\frac{1}{2}\sigma_t-\sigma_e=\int\bar{S}(1-\bar{S})d^2\rho. \tag{2}$$

当 $R_0\kappa\gg1$ 时，在积分式(2)中小距离（$\sim1/\kappa$，是从原子核边缘算起的是重要的，于是沿边缘的积分给出一个因子 $2\pi R_0$，沿垂直方向的积分可把阴影区看作以直线为界那样去计算，取此直线为 $y$ 轴，并取 $x$ 轴从阴影向外，我们有

$$\sigma_{蜕变}=2\pi R_0\int_0^\infty\bar{S}(x)[1-\bar{S}(x)]dx,$$

其中的积分

$$\bar{S}(x)=\int_{-\infty}^{\infty}\int_{-\infty}^{\infty}\int_{-2x}^{2x}\psi_d^2(R)\,dX\,dY\,dZ,$$

$$R=\sqrt{X^2+Y^2+Z^2},$$

对给定的 $x=\frac{1}{2}(X_n+X_p)$，上式是在 $X_n$，$X_p\geqslant0$ 的区域上积分，也就是在 $|X|=|X_n-X_p|\leqslant2x$ 区域上积分. 把积分变量变换成 $X$ 和 $R$ 以及 $YZ$ 平面内的极角后（此时 $dY\,dZ\longrightarrow2\pi R\,dR$），这个积分变成

$$\bar{S}(x)=1-e^{-4\kappa x}+4\kappa x\int_{4\kappa x}^{\infty}\frac{e^{-\xi}}{\xi}d\xi, \tag{3}$$

含有这个 $\bar{S}(x)$ 函数的积分(2)，可利用下式通过重复分部积分算出：

$$\int_0^\infty(e^{-\xi}-e^{-2\xi})\frac{d\xi}{\xi}=\ln2.$$

结果为[1]

$$\sigma_{\text{蜕变}}=\frac{\pi}{3\kappa}R_0\left(\ln 2-\frac{1}{4}\right).$$

---

在同一条件 $\kappa R_0 \gg 1$ 下，俘获截面为

$$\sigma_{\text{俘获}}=\pi R_0^2+\pi R_0/4\kappa$$

[(1)式对 $\rho>R_0$ 区的积分可用(3)式算出，对 $\rho<R_0$ 区的积分给出 $\pi R_0^2$]. 这个截面包括整个氘核的被俘以及俘获一个核子而释放另一个(剥裂反应). 后一种反应截面是按照只有一个核子射入阴影区时的碰撞面积(对 $\psi_d^2$ 平均以后)而算出的，并有

$$\sigma_{\text{俘获},n}=\sigma_{\text{俘获},p}=\pi R_0/4\kappa$$

(R. Serber, 1947).

# 索　引①


$H_2$ 分子　81

$H_2^+$ 离子　78,79,81

$jj$ 耦合　72,118

$LS$ 耦合(罗素-桑德斯情形)　72

$NH_3$ 分子的反演　105

$\frac{1}{v}$定律　142

$\delta$ 函数　5,15,42,124


## 二至四画


二元变换　56

反演变换　30

反应道　142

夫兰克-康登原理　90

幻数　118

介质中原子能级的位移　142

中间态　43

不可约张量　57

双能级系统的跃迁　40


## 五画


四极矩　75

正的和负的分子谱项　86,105

正氢和仲氢　86,151

正氦和仲氦　69

正多重线和倒多重线　72

电荷对称性　116

平面波　17,19,34

本征函数　3

冉邵尔效应　132

矢量模型　31

发光散射　127


## 六画


自旋-轨道作用　72,83,118

自旋-自旋作用　72,84

自旋-轴作用　83

自洽场　67,69,118

回转磁因子　113

同位旋　116

同极键和异极键　81

多余极点　128

约化矩阵元　29,107

交换积分　62

光学模型　142,145

光学定理　125,142

宇称选择定则　30

有效力程　133,138


① 这个索引是对本书目录的一个补充，索引中列出的是目录中未直接反映出的一些名词术语和概念。其中的阿拉伯数字表示节数。

## 七画

两重简并能级　39
壳层中的空穴　67,74
库仑单位　36
位形空间　2
克莱布许-高登系数　106
时间反演　7,18,44,60,96
极化密度矩阵　59
角动量选择定则　29,117
纯态和混合态　14
杨氏图　63
伽利略变换下波函数的变化规律　17
里德伯修正　68
杨-特勒效应　102
求和定理　149

## 八画

范德瓦耳斯力　81,82,89
波包　6,16
波函数的规范变换　111
拉卡系数　108
单位矢矩阵元　29
势阱　22
　一维～　22,23
　有心对称～　33,36,38
　浅～　45
势壁　25
势垒　25,50
势散射　134,145
泡利原理　61
泊松括号　9,12
欧勒角　58
物理叶　128
帕邢-巴克效应　113

## 九画

绝热微扰　41,53
玻恩近似　126,130,132
玻尔半径　36
玻尔磁子　111
衍射型散射　142
相对论双线和屏蔽双线　74
测量　1,7,44
相空间中的相格　48
相移　33
相干态　23
科里奥利作用　104
垒顶之上的反射　50,52
洪德定则　67
细致平衡原理　144
虹散射　127
俄歇效应　74

## 十画

原子的抗磁性　113
原子单位　36
原子的极化率　76,77
原子的电离
　阈值附近的～　147
　$\alpha$和$\beta$衰变中的～　41
　电场引起的～　77

原子在“冲击”下激发 41
原子形状因子 139
原子核的统计权重 86,105
原子核的张量力 117
倒易定理 125,140,144
能级宽度 44,134,145
朗道能级 112
朗德间距定则 72
偶然简并 36
偶态和奇态分子谱项 78
偶极矩 75
矩阵元的选择定则 97
矩阵的迹 12
准经典矩阵元 48
准定态 44,134,141
复合核 145
复轨道法 52,131
振荡定理 21
振子
  非谐～ 38
  在外场中的～ 41
  空间中的～ 33
  ～强度 149
振动角动量 104

## 十一画

虚能级 133,134
第二类碰撞 90
维格纳-埃伽定理 107
球张量 107

## 十二画

斯塔克效应 76,77,87
程函近似 131,152
等效态 67
散射矩阵 125,144
散射长度 132,133,138

## 十三画

微扰的绝热加入 42
碰撞下氚核的蜕变 52,152
碰撞中的电荷交换 90
算符
  平移～ 15
  共轭～ 3
  转置～ 3
  幺正～ 12
  厄密～ 3
椟力场中的量子数 32
塞曼效应 113,121
输运截面 126,139
雷其轨迹 141

## 十四画

磁场中的氢原子 112
磁场中的散射 131
磁矩 111,113,118,119
谱项的多重度 66,78

## 十五画至十八画

德布罗意波长 17
赝势 151
瞬时微扰 41